

Numéro d'ordre : 2560

THÈSE

présentée pour obtenir le titre de

**DOCTEUR DE
L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE
DE TOULOUSE**

Ecole doctorale : TYFEP
Spécialité : Dynamique des Fluides
Directeur de thèse : Thierry POINSOT

Par M. **Nicolas LAMARQUE**

**Schémas numériques et conditions limites
pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique
dans les foyers d'hélicoptère**

Soutenue le 6 Décembre 2007 devant le jury composé de :

Boniface NKONGA	Maître de conférences à l'Université de Bordeaux I	Rapporteur
Julien REVEILLON	Professeur à l'Université de Rouen	Rapporteur
Sébastien DUCRUIX	Chargé de recherche au laboratoire EM2C	Membre
Gérard LAVERGNE	Professeur à l'ENSAE	Membre
Vincent MOUREAU	Ingénieur TURBOMECA	Membre
Franck NICOUD	Professeur à l'Université de Montpellier II	Membre
Philippe VILLEDIEU	Professeur à l'INSA Toulouse	Membre
Thierry POINSOT	Directeur de Recherche à l'IMF de Toulouse	Directeur de Thèse

Réf. CERFACS : TH/CFD/07/117

Table des matières

Remerciements	5
Liste des symboles	9
Introduction	15
I LES en combustion diphasique	25
1 Modélisation mésoscopique des écoulements dispersés	29
1.1 Stratégies pour la simulation d'un spray dilué	29
1.2 Méthode Eulérienne par moyennage statistique	32
2 LES de la combustion diphasique	45
2.1 Equations de la combustion laminaire et monophasique	45
2.2 Equations de la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique - phase porteuse	54
2.3 Equations de la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique - phase dispersée	66
II Présentation et analyse numérique des schémas pour la LES de la combustion diphasique	71
3 Méthodes numériques pour la LES - Introduction	77
3.1 Schémas numériques pour la simulation aux grandes échelles	78
3.2 Travail de la partie II	86
3.3 Tableau récapitulatif des schémas étudiés pendant cette thèse	86

4	Méthodes numériques pour la LES - le code AVBP	89
4.1	Introduction	89
4.2	Nomenclature	93
4.3	Equations résolues et calcul des métriques	94
4.4	Les différents schémas de convection <i>cell-vertex</i>	98
4.5	Méthodes des résidus distribués et éléments finis	101
4.6	Schémas de la famille Taylor-Galerkin	112
4.7	Schémas de convection pour la partie diphasique	119
4.8	Termes de diffusion	120
4.9	Calcul des termes sources	123
4.10	Discretisation temporelle	125
4.11	Viscosité artificielle	129
4.12	Schémas de bords et conditions aux limites	135
5	Analyse de stabilité théorique et pratique des schémas de convection d'AVBP sur des cas tests académiques - domaine périodique	143
5.1	Présentation du problème et notations	144
5.2	Analyse spectrale et équation résolue - étude monodimensionnelle	145
5.3	Cas multidimensionnels	167
5.4	Comparaisons des schémas d'AVBP- expériences numériques	170
5.5	Conclusions et discussions	184
6	Analyse de stabilité théorique et pratique des schémas de convection d'AVBP sur des cas tests académiques - influence des conditions limites	189
6.1	Cavité acoustique 1D	190
6.2	Méthode de la matrice d'amplification	194
6.3	Application aux schémas d'AVBP	196
6.4	Résultats et comparaisons avec AVBP	203
6.5	Améliorations possibles de la précision globale des schémas	206
6.6	Conclusions	208
7	Application au foyer MERCATO (chambre de combustion académique)	211

7.1	Introduction - Contexte	211
7.2	Configurations	212
7.3	Géométrie A - écoulement monophasique	216
7.4	Géométrie B - écoulement diphasique réactif	240
III Passage aux chambres d'hélicoptère : prise en compte de l'acoustique entrée-sortie		269
8	Calcul des impédances d'entrée et de sortie d'une chambre de combustion	273
8.1	Introduction	273
8.2	Article	274
Conclusions et perspectives		307
Bibliographie		311
Annexes		315
A	Inversion de la matrice de masse	315
B	Optimisation des coefficients de schémas numériques d'ordre élevé pour la Simulation aux Grandes Echelles par algorithme génétique	317
B.1	Introduction	317
B.2	L'optimisation par algorithmes génétiques	318
B.3	Schémas Taylor-Galerkin pour une équation de convection linéaire mono-dimensionnelle et à coefficients constants	318
B.4	Résultats numériques	323
B.5	Conclusions et perspectives	328

TABLE DES MATIÈRES

Remerciements

Cette thèse a été effectuée au sein de l'équipe CFD du CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique) et financée par une bourse CIFRE Turbomeca. Je tiens donc à remercier Jean-Claude ANDRE, directeur du CERFACS et Claude BERAT, chef du département combustion de Turbomeca, pour m'avoir permis d'effectuer cette thèse dans les meilleures conditions et offert l'opportunité de travailler un mois au CTR (Center for Turbulence Research) de l'Université de Stanford.

Je tiens à remercier sincèrement tous les membres du jury pour m'avoir fait le plaisir et l'honneur d'accepter de juger mon travail. Merci à Boniface NKONGA et Julien REVEILLON d'avoir accepté d'être rapporteurs et avoir soulevé des questions intéressantes. Je remercie également Sébastien DUCRUIX, Vincent MOUREAU, Franck NICOUD et Philippe VILLEDIEU pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail. Enfin, je remercie Gérard LAVERGNE pour avoir tenu le rôle de président du jury et avoir lancé ma soutenance dans les meilleures conditions.

J'adresse ensuite toute ma reconnaissance aux personnes qui m'ont encadré pendant ma thèse : Bénédicte CUENOT, Laurent GICQUEL et Franck NICOUD toujours disponibles pour répondre aux questions et donner de nouvelles idées, tout ça dans une ambiance détendue et bien agréable. Un grand merci évidemment à mon directeur de thèse, Thierry POINSOT, jamais à court de remarques et d'énergie, sachant toujours comment remotiver et remettre le thésard en détresse dans le droit chemin. Merci aussi de m'avoir confié le Petit Livre noir de Vichnevetsky et Bowles [?] pendant trois ans ! Une pensée particulière à Nicolas SAVARY, ingénieur Turbomeca, avec qui je n'aurais pas travaillé pendant ces trois ans, mais qui a toute ma gratitude pour m'avoir grandement facilité la vie lorsqu'il fallait poser des jours de congé ou obtenir n'importe quel renseignement à Bordes. Enfin merci aussi à Dominique BISSIERES et Vincent MOUREAU qui ont très bien joué leur fonction d'encadrants Turbomeca.

Comme cela a été mentionné pendant la soutenance, j'ai passé le mois d'Avril 2006 à Stanford. L'ambiance était très studieuse mais aussi très chaleureuse. J'ai été fort bien accueilli par Vincent MOUREAU (encore lui, décidément !), alors post-doctorant au CTR et j'ai énormément appris à ses côtés. J'en profite pour remercier aussi Benoît FIORINA, Guillaume BLANQUART, Olivier DESJARDINS et tous les autres thésards du CTR que j'ai côtoyés et grâce à qui ce séjour s'est si bien passé.

Evidemment ces trois années de thèses (presque quatre si je compte la période stage de DEA) ne seraient pas aussi bien passées sans les post-doctorants, thésards et stagiaires avec qui j'ai travaillé, discuté ou simplement rigolé. Merci donc à Lolo et Karine (les anciens du bureau !), Alex, Val, Seb, Marta, Matthieu, Papy BENOIT, Aloïs, Antoine, Guilhem, Benoît, Jorge, Michaela, Guillaume, Felix, Jean-Mathieu, Mélodie, Olivier et bien sûr Tom (l'homme du "supercritique", apôtre du Picon-Bière).

Honte à moi si j'ai oublié quelqu'un.

Un grand merci également à Marie LABADENS, notre secrétaire, aux membres de l'administration du CERFACS et à l'équipe CSG. Si tout fonctionne aussi bien, c'est grâce à eux car ils nous facilitent grandement la vie et contribuent à la bonne ambiance du labo.

Ces trois années m'auront aussi permis de tester ma fibre mélomane. Grâce à Stéphane PASCAUD (au micro et parfois au clavier !), Ludovic THOBOIS (aux baguettes aussi épaisses que des troncs) et Mauro PORTA (guitariste aux doigts de fée), j'ai passé des samedis après-midi bruyants et pu démontrer qu'à la fin, c'est quand même la basse qui gagne ! Je reste sur Mauro (façon de parler) pour le remercier aussi pour les moments passés ensemble à tenter de percer les mystères de NSCBC et des termes de bord (le fameux $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}_h^n)$). Merci aussi au barbu Simon Mendez. Pour les discussions, les bilans et les coups de pied au c.. au moment de l'écriture du papier "Nozzle". Merci docteur ! ;-)

Toute ma gratitude va aussi à Gabriel "Pablo" STAFFELBACH et Olivier "Papy" VERMOREL. L'énorme boulot qu'ils ont fourni pour les versions 6.X d'AVBP, en particulier, et leur très grande disponibilité (même lorsqu'ils sont débordés) méritent un vrai coup de chapeau.

Je tiens à remercier aussi la *MERCATO Team* : Nicolás GARCÍA ROSA tout d'abord, mon 'siamois' de thèse de l'ONERA, qui a débuté sa thèse CIFRE Turbomeca en même temps que moi. Ce fut un plaisir de travailler avec toi ! Ensuite, évidemment, merci aux *Mercato Rangers*, Eléonore RIBER, as "Force Rouge" (merci pour toutes nos longues discussions, scientifiques ou non !), et Marlène SANJOSE, as "Force Bleue" (du coup, j'ai fini en Force Jaune... mais je n'ai pas choisi !)¹.

Je vais finir les remerciements Cerfaciens en parlant de mes collègues de bureau(x). D'abord les collègues de mon deuxième bureau (le 'pas-officiel'²) : Mathieu LEYKO, Anthony ROUX et Florent DUCHAINE. Le premier pour sa curiosité sans bornes (fais gaffe à ne pas tout faire péter chez toi quand même !) et ses bonnes idées pour les impédances. Le deuxième, membre de l'Orléans Connection, avec qui j'ai pris un très grand plaisir à travailler (et d'ailleurs on doit continuer !) et qui partage un humour assez proche du mien (parfois très subtil... et souvent pas du tout !!!) : un regard parfois suffit à nous lancer vers des voies encore inexplorées. Parfois ça m'effraie ;-). Enfin le dernier des trois, lui aussi lié à Orléans par sa moitié (qui se trouve être une très grande amie et mon ancienne - intraitable - binôme !), impressionnant d'efficacité au boulot et lui aussi capable de sortir les pires horreurs au nom de l'Humour (si si Flo, la vérité doit être faite !).

Terminons avec mes collègues de bureau (le vrai, cette fois³) : Guillaume BOUDIER (the 'Amazing Dindon'), Jacques LAVEDRINE (so british !) et Claude SENSIAU (Macho macho man). Grâce à ces trois individus, j'aurais passé trois années géniales. Je ne peux pas dénombrer toutes les discussions tantôt scientifiques, tantôt complètement délirantes que nous avons eues ensemble ou que j'ai eues avec chacun d'entre vous. Toujours est-il que j'en garderai beaucoup de très bons souvenirs : les 'mercredis gras', les craquages de certains soirs (en particulier pendant la phase de rédaction), les réflexions pince-sans-rire de Jacques, les fous rires au téléphone de Guillaume, les coups de gueule de Claude et ses blagues (parfois) mysogines (eh si...)... etc. MERCI !

¹Cette phrase démontre une fois encore qu'abuser du mouvement mésoscopique décorrélé (RUM) atteint gravement les neurones.

²aka 'La Presque-Ile de la Tentation'

³aka 'Le Carré des Poètes'

Pour finir, je tiens à remercier tous mes copains et copines pour les bons moments en dehors du travail. Un clin d'oeil à Mat, Guillaume, Anaïs et Mel pour être venus le jour de la soutenance. Ca m'a fait plaisir et m'a bien aidé ! Merci enfin à toute ma famille et en particulier mon Papa, ma Maman et ma moitié, Lara, pour leur patience et leur soutien pendant ces trois années. C'est à eux que je dédie ce travail.

REMERCIEMENTS

Liste des symboles

Abréviations - Partie I

DNS	Simulation Numérique Directe
DQMOM	Direct Quadrature Method Of Moments
LES	Simulation aux grandes échelles
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
RUM	Random Uncorrelated Model

Lettres romaines - Partie I

\check{c}_p	Pseudo-vitesse du son dans la phase dispersée
$\delta\check{R}_{p,ij}$	Tenseur des vitesses décorrélées
$\delta\check{S}_{p,ijk}$	Tenseur du troisième moment des vitesses décorrélées
δu_j	j -ième composante de la vitesse décorrélée des particules
\vec{c}_p	Vecteur vitesse d'une particule dans l'espace des phases
\vec{F}	Force
\vec{u}_p	Vecteur vitesse des particules
\vec{x}_p	Température des particules
\vec{x}_p	Vecteur positions des particules
B_M	Nombre de Spalding
C_d	Coefficient de traînée
C_S	Constante de Smagorinsky
C_p	Capacité calorifique massique à pression constante
C_v	Capacité calorifique massique à volume constant
D	Coefficient de diffusion
D	Longueur caractéristique (souvent un diamètre)

d	Diamètre
E	Energie totale massique volumique
e_s	Energie sensible massique volumique
f_p	Fonction densité de probabilité normalisée par le nombre de particules
G	Filtre LES
G	Nombre de combustion de groupe
h_s	Enthalpie sensible massique volumique
$J_{j,k}$	j -ième composante du flux diffusif de l'espèce k
m	Masse
N	Nombre d'espèces
N_p	Nombre de gouttes dans un nuage de gouttes
n_p	Nombre de gouttes par unité de volume
p	Pression
Pr	Nombre de Prandtl
q_j	j -ième composante du flux de chaleur
R	Constante des gaz parfaits
r	Constante des gaz d'un mélange
Re	Nombre de Reynolds
S	Paramètre de séparation
S_L^0	Vitesse de flamme laminaire
S_T	Vitesse de flamme turbulente
S_{ij}	Tenseur des taux de déformations
Sc	Nombre de Schmidt
Sh	Nombre de Sherwood
St	Nombre de Stokes

LISTE DES SYMBOLES

T	Température	ν_t	Viscosité cinématique turbulente
t	Temps	ν_{RUM}	Viscosité liée au mouvement décorrélé
u	Vitesse	$\overline{\tau_{ij}}$	Tenseur des contraintes visqueuses de sous-maille
u_j	j -ième composante de la vitesse	ϕ	Phase
V	Vitesse d'une particule discrète	ψ_p	Champ quelconque dans l'espace des phases
V	Vitesse de diffusion	ρ	Masse volumique
V	Volume	σ	Tension de surface
v	Vitesse	τ	Temps caractéristique
V_r	Vitesse relative entre les deux phases	τ_{ij}	Tenseur des contraintes visqueuses
W	Masse molaire	Ξ	Plissement
We	Nombre de Weber	ζ_p	Température d'une particule dans l'espace des phases
X	Fraction molaire	l_t	Echelle intégrale
X	Position d'une particule discrète		
Y	Fraction massique		
Lettres grecques - Partie I		Lettres spéciales - Partie I	
α	Fraction volumique de la phase dispersée	\mathbb{C}	Termes de collision
χ	Fonction indicatrice	\mathcal{E}	Fonction d'efficacité
$\delta\check{\theta}_p$	Energie du mouvement décorrélé	\mathcal{F}	Epaississement
Δ	Taille caractéristique du filtre LES	\mathcal{H}	Réalisation d'une phase
δ	Distance	\mathcal{N}_p	Nombre de réalisations du champ de particules
δ_L^0	Epaisseur de flamme laminaire	\mathcal{Q}_j	Taux d'avancement de la j -ième réaction
δ_{ij}	Tenseur de Kronecker	Opérateurs / Notations - Partie I	
$\dot{\omega}_k$	Taux de réaction de l'espèce k	$\langle \cdot \rangle_p$	Moyenne de phase pondérée par la masse des particules
$\dot{\omega}_T$	Taux de dégagement de chaleur	$\{ \cdot \}_p$	Moyenne de phase
η_K	Echelle de Kolmogorov	$\bar{\cdot}$	Grandeur filtrée
Γ	Taux de transfert de masse	$\bar{\cdot}$	Valeur moyenne mésoscopique (autre notation pour $\langle \cdot \rangle_p$)
γ	Coefficient polytropique	$\hat{\cdot}$	Grandeur filtrée au sens de Favre pour la phase dispersée
κ_{RUM}	Viscosité liée au mouvement décorrélé	$\tilde{\cdot}$	Grandeur filtrée au sens de Favre
λ	Conduction thermique	Indices - Partie I	
μ	Viscosité dynamique	∞	Loin de la goutte considérée
μ_p	Masse d'une particule dans l'espace des phases		
ν	Viscosité cinématique		

Σ	A la surface d'une goutte	PSI	Positive Streamwise Invariant
CC	Valeur de Clausius-Clapeyron	PVC	Precessing Vortex Core
$coll$	Relatif aux collisions	QUICK	Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics
F	Carburant	RK	Runge-Kutta
f	Relatif au fluide	SGE	voir LES
$f - p$	Relatifs aux transferts entre les gouttes et le gaz	SUPG	Streamline Upwind Petrov-Galerkin
O	Comburent	TTG	Two step Taylor Galerkin
p	Relatif aux particules	TVD	Total Variation Diminishing
t	Relatif aux termes de sous-maille	VMM	Variational Multiscale Method
Exposants - Partie I		Lettres romaines - Partie II	
$*$	Pour un tenseur, désigne la partie déviatrice	$[Q]$ ou $[Q]$	Matrice d'amplification
C	Relatif aux termes convectifs	$\mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{H}$	Flux des variables conservatives (vecteurs)
t	Relatif aux termes de sous-maille	\mathbf{U}	Vecteur des variables conservatives
V	Relatif aux termes visqueux	$\delta \mathbf{U}$	Mise à jour temporelle de la variable \mathbf{U}
Abréviations - Partie II		Δt	Pas de temps (s)
(W)ENO	(Weighted) Essentially Non Oscillatory	\dot{m}	Débit
ABC	Additional Boundary Correction	\mathbf{BT}_j	Terme de bord de la partie diffusive issue des méthodes Taylor-Galerkin au noeud $j \in \partial\Omega$ (vecteur)
BQUICK	Bounded QUICK	\mathbf{D}	Terme de diffusion artificielle (vecteur)
CFL	Courant-Friedrichs-Lewy (voir ν)	\mathbf{LL}_j	Terme diffusif pour les méthodes Taylor-Galerkin au noeud j (vecteur)
CV	Cell-Vertex	\mathbf{L}_j	Terme convectif pour les méthodes Taylor-Galerkin au noeud j (vecteur)
DC	Différences centrées	\mathbf{N}	Résidu distribué aux noeuds (vecteur)
EF	Elements Finis	\mathbf{R}	Résidu à la cellule (vecteur)
ETG	Euler Taylor Galerkin	\mathbf{S}	Vecteur contenant les termes sources
FCT	Flux Corrected Transport	\mathbf{W}	Vecteur des grandeurs caractéristiques
LDA	Low Diffusion A	\mathbf{Z}	Variables de Roe (vecteur)
LW	Lax-Wendroff	$\underline{\mathbf{A}}, \underline{\mathbf{B}}, \underline{\mathbf{C}}$	Matrices Jacobiennes des flux
MILES	Monotonically Integrated LES	$\underline{\mathbf{D}}_{j,e}$	Matrice de distribution du résidu de la cellule K_e au noeud j
MUSCL	Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws	$\underline{\mathbf{E}}_{\mathbf{U}}$	Matrice $\vec{\mathcal{A}} \cdot \vec{n}$
N	Narrow		
NSCBC	Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions		
PPM	Piecewise Parabolic Method		

\mathbf{Id}	Matrice identité	s	Rapport stoechiométrique
\mathbf{L}_U	Matrice des vecteurs propres (lignes) à gauche de \mathbf{E}_U	t	Temps
\mathbf{R}_U	Matrice des vecteurs propres (colonnes) à droite de \mathbf{E}_U	u	Champ scalaire
\vec{n}	Vecteur unitaire, désignant souvent une normale sortant d'un domaine	U_k	Valeur de l'approximation u_h de la solution au noeud k
\vec{S}	Normale pondérée	u_τ	Vitesse de frottement
\vec{c}	Vecteur vitesse de convection	V	Mesure (surface ou volume) d'une cellule ou d'un volume de contrôle associé à noeud
\vec{x}	Vecteur position	w_j	Fonction poids au noeud j
A	Opérateur de semi-discrétisation spatiale	x, y, z	Coordonnées dans l'espace
c_φ	Vitesse de phase	Z	Scalaire passif
D	Coefficient de diffusion	z	Fraction de mélange
d	Nombre de dimensions du domaine Ω	Lettres grecques - Partie II	
ET	Erreur de troncature	χ_j	Fonction caractéristique au noeud j
F	Nombre de Fourier	Δ	Longueur de référence
f	Fréquence	ϵ	Erreur
G	Coefficient d'amplification	ϵ	Paramètre utilisateur pour les viscosités artificielles
H	Méthode d'avancement en temps	κ	Hyperviscosité (viscosité d'ordre 4)
h	Pas d'espace ou taille caractéristique d'une cellule	λ	Longueur d'onde
K	polygone ou polyèdre	λ	Valeur propre
k	Nombre d'onde	ν	Nombre de Courant-Friedrichs-Lewy ou CFL
k_l	Paramètre d'entrée de l'écoulement au sommet l	Ω	Relation de dispersion
k_{res}	Energie cinétique turbulente résolue	Ω	Volume de contrôle / Domaine de calcul
k_{sgs}	Energie cinétique turbulente de sous-maille	ω	Pulsation (temporelle)
m	Entier positif, nombre de variables conservatives	ϕ	Richesse
N_h	Entier positif, nombre de noeuds dans le maillage	Φ_e	Fluctuation à la cellule (scalaire)
N_K	Nombre de cellules	ϕ_G	Phase du coefficient d'amplification
n_v	Entier positif, nombre de sommets	ϕ_j	Fonction de forme
Q	Critère Q	ρ	Rayon spectral
S	Nombre de swirl	τ_w	Frottement pariétal
		$\underline{\mathbf{A}}$	Matrice diagonale contenant les valeurs propres de $\mathcal{A} \cdot \vec{n}$
		ξ	Nombre d'onde adimensionné

ζ Détecteur de forts gradients

Lettres spéciales- Partie II

$\vec{\mathcal{F}}$ Tenseur des flux des variables conservatives

\Im Partie imaginaire

\mathcal{C}_j Volume de contrôle associé au noeud j

\mathcal{D}_j Ensemble de cellules liées au noeud j

\mathcal{K} Matrice de convection

\mathcal{L} Matrice de raideur

\mathcal{M} Matrice de masse

\mathcal{T}_h Maillage

\mathcal{L} Vecteurs des ondes caractéristiques (cf. NSCBC)

\Re Partie réelle

$\vec{\mathcal{A}}$ Tenseur des Jacobiennes des flux

V_g Vitesse de groupe

Opérateurs / Notations - Partie II

$[\cdot]$ Matrices carrées de taille $m N_h \times m N_h$

$\langle \cdot \rangle$ Moyenne temporelle

$\{\cdot\}_{inj}$ Moyenne surfacique sur la surface d'injection

$\{\cdot\}$ Vecteurs de taille $m N_h$

$\bar{\cdot}$ Valeur moyennée en temps

\cdot' Valeur acoustique

$\hat{\cdot}$ Coefficient ou transformée de Fourier

Indices - Partie II

b Aux bords du domaine de calcul

c Au centre du domaine de calcul

e Entier positif, relatif aux éléments ou cellules

f Entier positif, relatif à une arête / face

h Relatif à la discrétisation

I Partie imaginaire

j Entier positif, relatif aux noeuds

k Entier positif, relatif aux sommets des cellules (parfois aussi utilisé comme indice muet pour la méthode de Galerkin)

l Entier positif, relatif aux sommets des cellules

R Partie réelle

Exposants - Partie II

(c) Valeur corrigée par les conditions limites

(CL) Partie modifiée par la condition limite

(p) Valeur prédite par le schéma numérique

(u) Partie non modifiée par la condition limite

$*$ Relatif au schéma numérique

C Partie convective

$D_{j,e}$ Coefficient de distribution du résidu de la cellule K_e au noeud j

ff Relatif à une face appartenant à la frontière $\partial\Omega$

i $\sqrt{-1}$

n Entier positif, relatif aux itérations temporelles

n Entier positif, relatif à la discrétisation temporelle

V Partie visqueuse

Introduction

Contexte d'étude

Défis et besoins de la combustion dans l'industrie

A l'heure actuelle, les combustibles fossiles représentent la principale source d'énergie dans le monde, aussi bien pour la production d'électricité que pour le transport. La combustion des énergies fossiles (gaz et pétrole) présente deux inconvénients majeurs :

- ▷ Les combustibles fossiles ne sont pas inépuisables. Les prévisions concernant les réserves restantes de pétrole, gaz naturel et charbon sont souvent alarmantes (quelques dizaines d'années pour le pétrole, par exemple).
- ▷ L'impact sur l'environnement est considérable. L'augmentation de l'effet de serre et *a fortiori* une partie du réchauffement climatique dû à l'activité humaine, en particulier depuis la Révolution Industrielle, ne sont désormais plus contestés.

Malgré les alternatives possibles, notamment en ce qui concerne la production d'électricité (énergie nucléaire, hydraulique, solaire, éolienne...), la combustion reste prépondérante. Dans le domaine du transport aérien, elle s'avère encore indispensable puisque sans concurrent. A l'heure actuelle, il n'est donc pas question de stopper la combustion des énergies fossiles. L'objectif actuel est donc de réduire au maximum la consommation ainsi que l'émission des polluants.

Pour des raisons de sécurité, les flammes des foyers aéronautiques sont principalement de diffusion, c'est-à-dire que carburant et comburant ne sont pas mélangés avant d'entrer dans la chambre de combustion. Ces flammes sont plus stables et plus sûres que les flammes de prémélange car elles ne se propagent pas [?]. Cependant, les champs de température obtenus dans la chambre de combustion sont plus hétérogènes et les températures maximales sont souvent plus élevées. Or, des polluants, comme les oxydes d'azote NO_x , nocifs pour la couche d'ozone, se forment principalement dans les zones très chaudes de la chambre (voie thermique). Une solution est donc de diminuer les températures maximales mais au risque de faire apparaître d'autres polluants comme le monoxyde de carbone CO . Il existe donc une fourchette de températures maximales atteintes dans la chambre, comme le montre la figure 1, qui assure une réduction conséquente de ces deux polluants. Pour atteindre cette fenêtre, les industriels s'orientent de plus en plus vers une combustion prémélangée avec des richesses basses, afin de réduire à la fois la pollution et la consommation. Toutefois, ce régime de combustion a le défaut majeur d'être propice aux instabilités de combustion [?]. Celles-ci sont non seulement dangereuses pour le système au sein duquel elles apparaissent (ce qui peut conduire à l'endommagement voire à la destruction) mais peuvent en outre émettre plus de polluants [?].

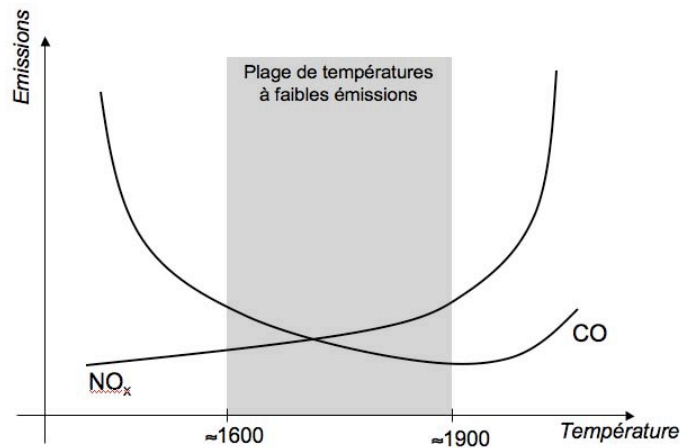


FIG. 1 - Emissions de monoxyde de carbone et d'oxydes d'azote en fonction de la température dans la zone primaire de la chambre de combustion. La fenêtre grisée correspond à l'objectif des motoristes.

La connaissance, la compréhension et la maîtrise des instabilités de combustion sont donc des enjeux considérables pour les industriels dans le but d'obtenir une combustion à la fois plus efficace et moins polluante. Les instabilités de combustion peuvent s'exprimer de différentes manières, à travers un couplage entre plusieurs phénomènes (fluctuations acoustiques, d'entropie ou de vorticité), la flamme étant toujours au centre de la boucle. On peut prendre l'exemple de la figure 2 pour décrire de façon simplifiée un scénario possible. Une fluctuation (acoustique, entropique ou encore de vorticité) passant à travers la flamme peut exciter celle-ci. En réponse, la flamme peut engendrer une onde acoustique et une onde entropique se propageant vers l'aval. Celles-ci peuvent générer, en atteignant les bords du domaine (murs ou sortie), des ondes acoustiques, susceptibles de remonter l'écoulement et d'exciter à nouveau la flamme, voire remonter plus en amont et perturber l'injection de carburant. Le tout, comme on le constate, forme une boucle qui peut, le cas échéant, être instable. Il est difficile de pouvoir prédire si un système va être instable. Ainsi, mettre en place des critères de stabilité demeure un vrai défi [?]. Dans ce contexte, la simulation numérique a un rôle important à jouer et, tout particulièrement, la simulation aux grandes échelles (SGE ou LES pour *Large-Eddy Simulation*). Cette méthode de calcul sera présentée dans la suite de cette partie. Contrairement aux stratégies RANS (pour *Reynolds Averaged Navier-Stokes*) qui sont souvent associées à des états stationnaires, la LES permet de reproduire des écoulements turbulents fortement instationnaires, une des clés essentielles pour observer et étudier les instabilités.

Les résultats, notamment obtenus à l'EM2C par Rey [?] et au CERFACS par Selle [?, ?], Martin [?, ?] et Giauque [?, ?], sont autant d'exemples démontrant la capacité de la LES à simuler et à prédire des instabilités de combustion dans des géométries de plus en plus complexes, ce qui motive chercheurs et industriels. Il reste toutefois encore de nombreux points à travailler comme on va le présenter plus loin. Un des points concerne notamment la prise en compte de la phase dispersée. Jusqu'à présent, bon nombre de LES, y compris les travaux qu'on vient de citer, considéraient une combustion au sein d'un écoulement monophasique. Dans certains cas, il s'agit effectivement du mode de fonctionnement de la chambre, les turbines à gaz destinées à la production d'électricité en sont un exemple. Dans les foyers aéronautiques ou dans les moteurs à piston, cela n'est pas toujours le cas.

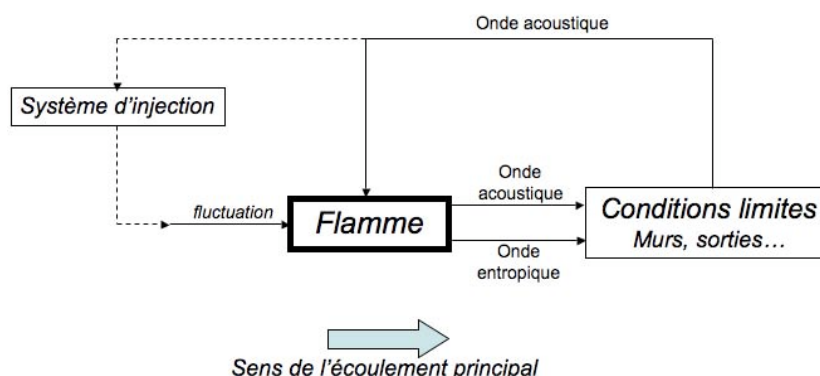


FIG. 2 - Un exemple de diagramme présentant des boucles pouvant générer des instabilités de combustion. La flamme a un rôle central.

Sprays et combustion

Sprays

Dans bien des applications industrielles, le carburant peut être une phase liquide dans la chambre de combustion. En effet, le stockage et le transport sont bien plus simples et sûrs que pour un gaz. Dans un foyer aéronautique, le carburant est souvent injecté directement dans la chambre de combustion via un ou plusieurs atomiseurs. Ceux-ci permettent de générer un spray dilué⁴ de gouttes, augmentant ainsi considérablement la surface totale de la phase liquide, ce qui favorise les échanges avec le gaz environnant. Les étapes intermédiaires entre un jet liquide (état continu) et un brouillard composé de gouttelettes supposées sphériques (état dispersé) sont appelées atomisations et sont représentées sur la figure 3. Le nombre caractéristique le plus souvent associé à cette désintégration est le nombre de Weber :

$$We = \frac{\rho V_r^2 D}{\sigma} \quad (1)$$

où ρ est la masse volumique du gaz, V_r la vitesse relative entre les deux fluides, D une taille caractéristique et σ la tension de surface du liquide. Le nombre de Weber compare les forces aérodynamiques aux tensions de surface et est utilisé afin de fixer un seuil au-delà duquel il y a atomisation (pour une goutte ou un jet).

Les deux étapes les plus importantes avant d'obtenir un spray dilué sont les suivantes [?] :

- ▷ La première étape est l'atomisation primaire. La rupture de la nappe ou du jet de liquide sortant de l'injecteur est principalement due à la grande différence de vitesse entre les deux phases, générant un cisaillement important. Celui-ci crée des instabilités au sein du liquide qui s'amplifient et déforment le jet. La tension de surface provoque alors la rupture en ligaments (minimisation de l'énergie de surface). La phase liquide n'est plus continue.
- ▷ L'atomisation secondaire regroupe un très grand nombre de phénomènes. Tout d'abord, les ligaments se déforment en interagissant avec le gaz et se rompent en de plus petites structures. Des gouttes instables, car n'ayant pas une forme sphérique, apparaissent et se désintègrent, à leur tour, de différentes manières selon leur nombre de Weber. Tant que le spray est suffisamment dense, les

⁴On reviendra brièvement sur la notion de dilution plus tard.

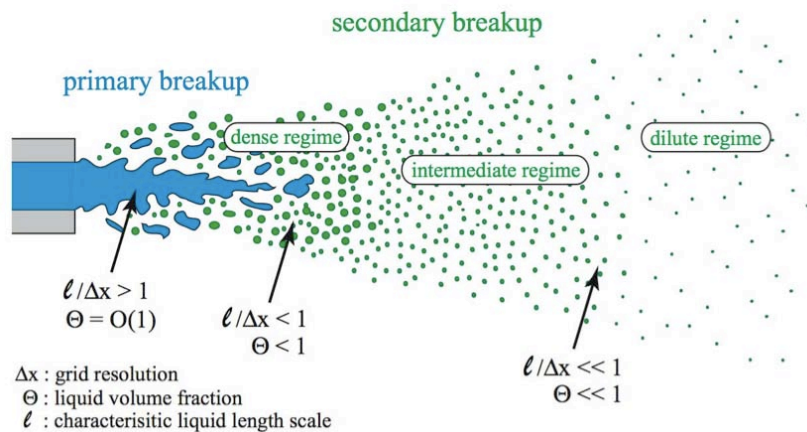


FIG. 3 - Schéma présentant les différentes étapes de l'atomisation, du jet liquide sortant de l'atomiseur au brouillard de gouttes. Cette image est tirée d'une présentation de M.Herrmann au Summer Program 2006 du CTR de Stanford.

collisions sont nombreuses et complexes. Elles peuvent provoquer la coalescence entre les gouttes ou bien la rupture.

Le brouillard dilué obtenu est polydisperse (le diamètre des gouttes est variable en son sein), composé de gouttelettes dont les tailles et les vitesses varient sensiblement selon le type d'atomiseur, le débit de liquide et l'environnement dans lequel celui-ci débouche. L'atomisation est un phénomène chaotique, il est difficile de prévoir *a priori* quelles seront les caractéristiques du spray.

Il existe un grand nombre d'atomiseurs s'appuyant sur différentes technologies pour générer un spray. On en cite deux assez répandues dans les foyers aéronautiques [?] :

- ▷ Les atomiseurs pressurisés : le seul moteur est la différence de pression entre le réservoir et la chambre. Le liquide est déstabilisé par les interactions avec les parois de l'injecteur et débouche dans le foyer par un orifice généralement circulaire et de très petite taille. Ce sont les systèmes les plus simples à fabriquer. Certains appliquent un mouvement de swirl au jet (comme les atomiseurs simplex ou duplex) afin d'obtenir un spray avec un angle important. Les atomiseurs pressurisés ont l'avantage de produire des sprays assez homogènes en taille de gouttes. Cependant, il est nécessaire d'appliquer un grand différentiel de pression pour assurer un débit suffisant.
- ▷ Les atomiseurs pressurisés assistés : le liquide interagit avec de l'air avant d'être injecté dans la chambre afin de le déstabiliser plus tôt. Cette méthode permet de diminuer le différentiel de pression nécessaire à une bonne atomisation avec les injecteurs précédents et d'utiliser des carburants plus visqueux.

Quelques mots sur la combustion diphasique

La présence de brouillards de gouttes dans le foyer augmente donc considérablement les phénomènes à prendre en compte et l'impact sur la combustion est loin d'être négligeable [?]. Même dans le cas où la combustion est homogène (zones d'évaporation et de combustion séparées), le mélange turbulent du carburant et du comburant est fortement déterminé par le transport des gouttes. Celles-ci étant des objets ponctuels, le champ de vapeur de fuel est ainsi fortement hétérogène, ce qui est une source de fluctuation pour la flamme (qu'elle soit prémélangée ou pas). Lorsque zones d'évaporation et de réaction se super-

posent, on peut alors assister à différents modes de combustion de spray [?, ?, ?] (voir figure 4). Ceux-ci sont classés en fonction de différents paramètres, notamment le nombre G , définissant la combustion de groupe et s'écrivant :

$$G \simeq \frac{5N_p^{2/3}}{S}$$

où N_p est le nombre de gouttes dans le brouillard et $S = \delta_s/\delta_{rf}$ le paramètre de séparation, avec δ_s la distance moyenne entre les gouttes et δ_{rf} un rayon caractéristique d'une flamme de diffusion entourant une goutte isolée évaporante. On notera que, dans le cas d'un spray dilué, on a l'approximation suivante : $\delta_s = n_p^{-1/3}$ où n_p est le nombre de gouttes par unité de volume.

Lorsque $G \gg 1$, alors on parle de combustion externe. Les gouttes étant trop proches, la diffusion de chaleur ne peut se faire correctement entre elles. Seules les gouttes situées le plus à l'extérieur s'évaporent et une flamme se forme alors autour du nuage. A l'inverse, pour $G \ll 1$, les gouttes sont très éloignées les unes des autres permettant à la chaleur de circuler entre elles et provoquant une évaporation et une combustion individuelle. Borghi [?] décrit en outre d'autres modes de combustion (par poches ou par percolation) en introduisant des temps caractéristiques chimiques et d'évaporation. A cela s'ajoute la flamme épaissie ou combustion distribuée, qui apparaît lorsque le temps d'évaporation est très long devant le temps chimique. Les gouttes ont alors le temps de pénétrer la zone de réaction et la flamme s'épaissit (la flamme est plus large que la distance entre gouttes).

Comme le soulignent Réveillon et Vervisch [?], les descriptions précédentes ne prennent pas en compte deux facteurs importants. Le premier est la richesse globale du spray (proportionnel au rapport entre masse de fuel liquide et masse d'oxydant), qui va avoir une importance considérable sur la distribution locale de carburant gazeux et donc sur le type de flamme rencontré dans le foyer. Par exemple, des zones très riches peuvent apparaître et être en dehors des limites de flammabilité. Le second paramètre est l'advection. La description précédente n'en tient pas compte, or là encore, il est clair que dans un brûleur réel, la vitesse du gaz et des gouttes va avoir une influence certaine sur la topologie de la flamme. Ils ont donc mené une étude complète à l'aide de DNS d'un spray dilué dont la richesse globale, le temps d'évaporation et la séparation entre les gouttes varient, pour des cas laminaires et faiblement turbulents. Ils mettent ainsi en évidence différentes structures de flammes, en plus de celles décrites par Borghi. Les trois principales sont les suivantes (voir la figure 5) :

- ▷ *Combustion externe* : elle correspond à un régime dans lequel il existe une flamme continue. Cette combustion externe peut être "fermée" (faible richesse, le spray est enfermé par la flamme, la combustion est principalement prémélangée) ou "ouverte" (richesse plus importante, la flamme se positionne au niveau de la ligne stoechiométrique).
- ▷ *Combustion de groupe* : les gouttes brûlent par paquets. La combustion peut être prémélangée riche ou bien de diffusion.
- ▷ *Combustion hybride* : il s'agit d'un mode situé entre les deux précédents. On assiste à de la combustion prémélangée par paquets. Cependant, comme la richesse globale est plus importante, les fronts de diffusion ne peuvent se stabiliser autour des gouttes. Le fuel restant brûle en formant une flamme de diffusion à l'extérieur du spray.

Dans une configuration complexe avec des zones de recirculation et un spray polydisperse, il est fort probable qu'on rencontre tous les types de flammes évoqués précédemment. Cependant, il faut bien noter que dans une LES de combustion diphasique dans un foyer aéronautique (cf. chapitre 7), il n'est pas possible de fournir une description aussi précise, l'échelle des phénomènes décrits précédemment étant trop petite. Ceux-ci sont donc principalement modélisés.

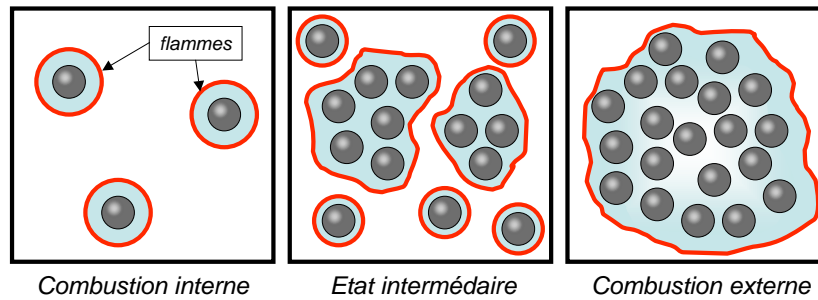


FIG. 4 - Trois différents régimes de combustion de spray au repos. De gauche à droite, on a $G \gg 1$, $G \simeq 1$ et $G \ll 1$. [?].

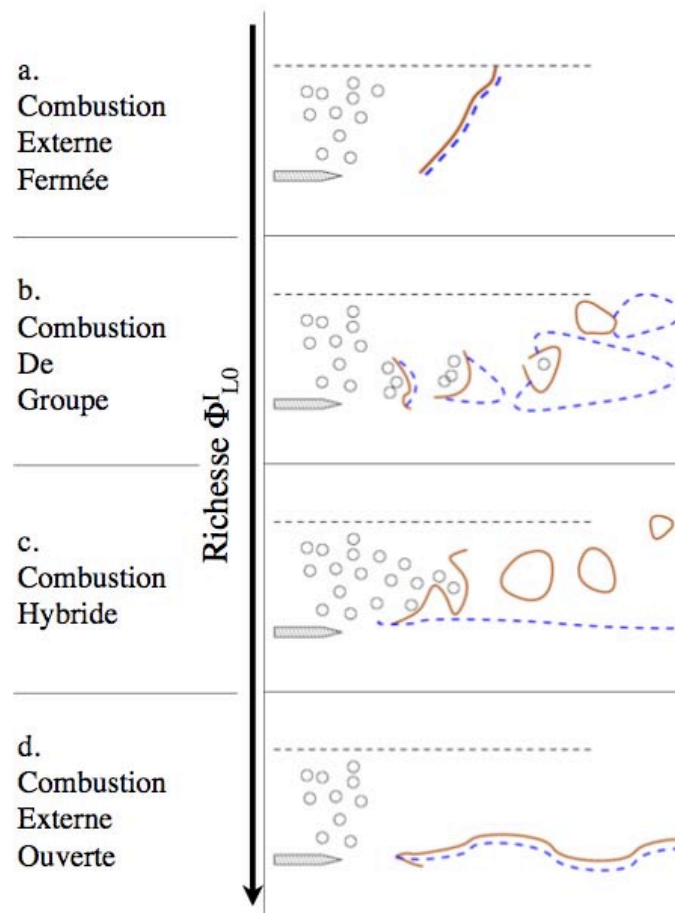


FIG. 5 - Différents types de combustion d'un spray observés par Réveillon et Vervisch [?].

Spécificités de la LES de la combustion diphasique dans une chambre de combustion réelle

L'étude de la combustion, mono- ou diphasique, dans une géométrie simplifiée ou même un domaine périodique, grâce à la Simulation Numérique Directe (ou DNS pour *Direct Numerical Simulation*) ou la LES, est très riche en enseignements et permet de mieux comprendre les mécanismes de base et les interactions entre les différents événements (évaporation, mélange turbulent, réaction chimique, acoustique...). Elle sert de référence et permet de créer des modèles. Les LES de la combustion dans

les chambres réelles font intervenir **tous** les phénomènes en même temps, ainsi que les interactions de ceux-ci avec leur environnement (parois, obstacles...). Pour obtenir des résultats acceptables tant qualitativement que quantitativement, il est nécessaire de prendre en compte le plus de mécanismes possibles avec suffisamment de finesse. Cependant, la précision requise ne doit ni augmenter considérablement le coût de calcul, ni nuire à la stabilité de calcul, déjà grandement diminuée à cause de la présence de bords. En se basant sur une chambre de combustion d'un moteur aéronautique, on va présenter quelques-unes des spécificités des LES d'écoulements diphasiques réactifs.

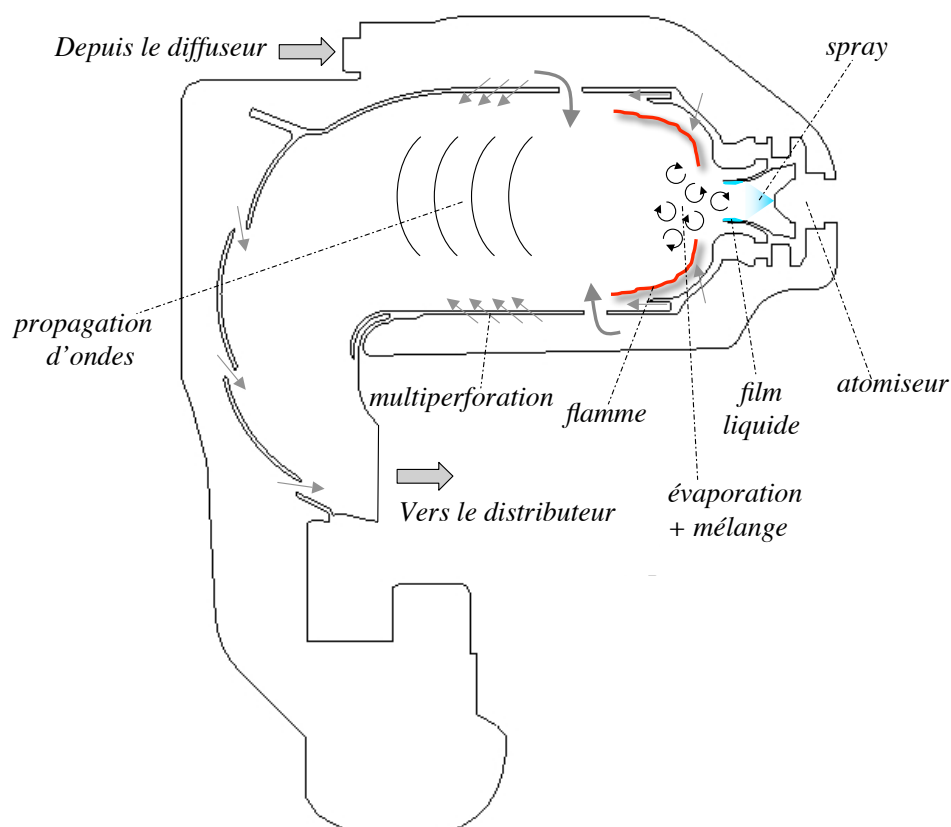


FIG. 6 - Coupe longitudinale d'un foyer aéronautique et mise en évidence de certains phénomènes s'y produisant.

La figure 6 est une coupe longitudinale d'un foyer aéronautique. Afin de reproduire au mieux la combustion dans cette chambre, il faut essayer de tenir compte, autant que faire se peut, de nombreux phénomènes en jeu et de restrictions :

- ▷ *Maillage* L'exemple choisi permet d'illustrer les difficultés liées à la discrétisation du domaine de calcul. Les systèmes d'injection peuvent être formés de plusieurs tourbillonneurs, composés eux-mêmes de plusieurs pales qui peuvent avoir des formes variées. Les parois des chambres sont souvent percées en plusieurs endroits (trous primaires, trous de dilution, films de refroidissement, multiperforations). Dans la majorité des cas, les écoulements sont résolus, ce qui implique la présence de mailles de tailles très différentes et des raffinements variables. L'emploi de grilles non structurées est alors préconisé.
- ▷ *Flamme turbulente* Bien que les cellules du maillage puissent atteindre des tailles très faibles, certaines échelles ne sont pas reproductibles dans la simulation comme les plus petits tourbillons ou la flamme dont l'épaisseur est très inférieure au millimètre. Il est donc nécessaire d'utiliser

des modèles afin de pouvoir résoudre la flamme et tenir compte de l'effet de la turbulence de sous-maille sur l'écoulement et sur la flamme.

- ▷ *Propagation d'ondes* Au sein d'un écoulement compressible et réactif, d'une manière générale, un grand nombre d'ondes se propagent [?]. Celles-ci sont de différentes natures (entropique, acoustique, vorticale...), d'échelles très diverses et se propagent à des vitesses qui varient sensiblement. Une *méthode de résolution précise* est donc nécessaire. Ainsi, le schéma numérique de convection doit avoir, dans la mesure du possible, deux qualités importantes afin de ne pas dégrader l'information : il ne doit pas amortir le signal transporté et la vitesse de propagation doit être correcte. Sur maillage non structuré et dans une géométrie complexe, il est très délicat d'obtenir les deux qualités à la fois, tout en assurant la stabilité nécessaire et un coût de calcul raisonnable.
- ▷ *Limites du domaine de calcul* Le domaine de calcul est **borné et fermé**. Cela se traduit par la présence de murs, d'entrées et de sorties. Par rapport à un domaine périodique, cela implique deux conséquences de taille. Tout d'abord, il convient d'imposer des **conditions limites** dans le calcul, permettant de mimer au mieux la physique. Si le choix de ces conditions limites est important (et n'est pas toujours trivial), le **traitement numérique** de celles-ci l'est d'autant plus. Ainsi, dans une LES d'un fluide compressible et réactif, la gestion de l'acoustique est primordiale et l'emploi de conditions limites avec **décomposition en ondes caractéristiques** est indispensable. La seconde conséquence de la présence des bords est la perte de précision des discrétisations spatiales. Celle-ci, pourtant locale, peut avoir des effets néfastes sur la qualité globale de la solution.
- ▷ *Phase liquide* La majorité des systèmes de combustion fonctionne avec des **carburants liquides**, par souci de sécurité et facilité de stockage. En plus de tous les phénomènes physiques qui se produisent en combustion monophasique (mélange turbulent, écoulement multi-espèces, réactions chimiques...), un **écoulement diphasique** implique des événements supplémentaires à prendre en compte. Simuler les atomisations primaire et secondaire des nappes liquides puis ligaments sortant de l'atomiseur reste difficile et contraignant. Les intégrer dans une simulation de combustion en géométries complexes n'est pas encore envisageable bien que des tentatives aillent dans ce sens. Pour simuler une injection liquide, il faudra donc avoir à faire des simplifications importantes. De la même manière, la génération de films liquides ou même l'impact de gouttes sur certaines parois peuvent avoir une grande conséquence sur les caractéristiques de vitesses et de tailles de gouttes du brouillard se propageant vers la flamme.
- ▷ *Interaction liquide-gaz* La **dispersion** du nuage de gouttes, les **échanges entre phases** (de quantité de mouvement, de chaleur, de masse), l'interaction avec la **turbulence** et l'**évaporation** font partie des phénomènes qu'une LES diphasique se doit de pouvoir simuler, car ils ont un impact certain sur la combustion. La résolution de la **phase dispersée** est particulièrement **délicate**. Le choix de la stratégie pour simuler la propagation d'un brouillard de gouttes est primordial. Les équations sont très instables une fois discrétisées. Il est donc nécessaire d'utiliser des **méthodes numériques adéquates** et dont les qualités peuvent être très différentes de celles évoquées précédemment.

Un autre outil pour l'étude des instabilités : les solveurs de Helmholtz

Les instabilités thermo-acoustiques sont particulièrement dangereuses et peuvent provoquer des dommages sévères dans les chambres de combustion. Il est donc primordial de pouvoir les contrôler. Comme on l'a mentionné précédemment, la LES est un outil très précis mais encore coûteux. Une alternative pour étudier le couplage entre une flamme et l'acoustique consiste à utiliser les solveurs de Helmholtz multidimensionnels [?], permettant de résoudre l'équation des ondes sonores dans un milieu réactif et dans une géométrie complexe. Ceux-ci ne s'intéressent qu'aux champs acoustiques ce qui rend les calculs moins longs. Néanmoins, à l'instar de LES, la définition des conditions limites reste cruciale. Celles-ci s'expriment à travers les impédances acoustiques qu'il est nécessaire de déterminer avec précision.

Objectifs

Dans cette thèse, on va présenter deux outils numériques et certaines applications. Le premier code de calcul, AVBP, permet de réaliser des simulations aux grandes échelles d'un écoulement turbulent, diphasique et réactif. Le second, appelé NOZZLE, permet de déterminer les impédances acoustiques dans les tuyères et donc de déterminer les conditions limites acoustiques pouvant être utilisées dans un solveur de Helmholtz. Les objectifs de cette thèse sont les suivants :

- ▷ Une évaluation détaillée des méthodes numériques utilisées dans AVBP, en particulier des schémas de convection. Le but est de montrer à quel point ceux-ci sont adaptés aux LES mono- et diphasiques, et comment ils peuvent être améliorés, si nécessaire. Pour ce faire, une description complète de ces méthodes numériques doit être faite dans un premier temps, puis des calculs d'erreurs théoriques et pratiques. L'influence des bords du domaine de calcul est par ailleurs considérable. De ce fait, le choix du traitement des conditions limites ainsi que des discrétisations spatiales est à étudier.
- ▷ L'étude de la combustion diphasique dans une géométrie complexe à l'aide d'une description Eulerienne de la phase dispersée. On cherche à connaître les possibilités de cette méthodologie et à décrire le type de flamme que l'on peut rencontrer dans cette situation. En outre, les études de l'écoulement monophasique non réactif puis de l'écoulement diphasique réactif représentent des tests "grandeur nature" pour les méthodes numériques d'AVBP.
- ▷ La présentation de trois stratégies pour déterminer les impédances acoustiques de tubes à section variable tels que les diffuseurs et distributeurs haute pression installés en amont et en aval des foyers aéronautiques. Ces méthodes de calcul permettent de fournir des conditions limites acoustiques précises, particulièrement utiles pour les solveurs de Helmholtz.

Plan

Ce manuscrit est composé de trois parties distinctes :

- La **partie I** de cette thèse rappelle les équations permettant de décrire l'évolution d'un écoulement compressible, turbulent, diphasique et réactif, comme on peut en rencontrer dans une chambre de combustion aéronautique ou d'un moteur à piston. Dans le chapitre 1, on évoque brièvement certaines méthodes numériques pour simuler un brouillard de gouttes puis on présente le formalisme Eulerien choisi et utilisé dans cette thèse.
- Le chapitre 2 rappelle ensuite les équations de Navier-Stokes pour un fluide compressible multi-

espèces et réactif. On dépeint rapidement les principes de la simulation aux grandes échelles puis le filtrage des équations du gaz et du liquide. On détaille en outre les différents modèles utilisés, en particulier celui de *flamme épaissie* pour la combustion.

- La **partie II** commence par une description rapide des schémas de convection utilisés souvent pour la simulation aux grandes échelles sur maillages structurés et non-structurés (chapitre 3). On introduit ensuite dans le chapitre 4 les méthodes de discrétisation utilisées dans AVBP. On décrit en particulier la formulation *cell-vertex* et on rappelle ses liens avec les éléments finis et les schémas Taylor-Galerkin implantés dans le code spécialement pour réaliser des LES [?]. Les chapitres 5 et 6 apportent une analyse numérique détaillée des schémas de convection exposés dans le chapitre 4, sans et avec les bords du domaine. Cette analyse se compose de calculs d'erreurs théoriques et pratiques. Enfin, le chapitre 7 fournit les résultats obtenus en utilisant AVBP pour simuler un écoulement monophasique puis un écoulement diphasique réactif dans une géométrie complexe dont les caractéristiques sont proches de celles des chambres de combustion des moteurs d'hélicoptères. Ce chapitre permet à la fois de présenter certains phénomènes se produisant dans ce type de foyer et d'évaluer les méthodes numériques employées pour résoudre le problème étudié.
- La **partie III** est une description de trois méthodes pour calculer les impédances acoustiques de tubes à section variable. Ceci est en effet très utile pour caractériser les conditions limites nécessaires pour calculer les modes propres acoustiques d'un foyer aéronautique.

Première partie

LES en combustion diphasique

Table des matières

1	Modélisation mésoscopique des écoulements dispersés	29
1.1	Stratégies pour la simulation d'un spray dilué	29
1.1.1	Introduction - particule isolée	29
1.1.2	Méthodes Lagrangiennes	30
1.1.3	Méthodes Eulériennes	31
1.2	Méthode Eulérienne par moyennage statistique	32
1.2.1	Principes de la méthode	32
1.2.2	Equation de transport de la <i>fdp</i>	33
1.2.3	Moyennes dans l'espace des phases	33
1.2.4	Equation de Enskog généralisée	34
1.2.5	Notions de grandeurs mésoscopiques et de mouvement décorrélé (RUM)	35
1.2.6	Equations de conservation	36
1.2.7	Termes d'échange entre les phases et modèles	38
1.2.8	Simplifications pour la suite et discussion	41
2	LES de la combustion diphasique	45
2.1	Equations de la combustion laminaire et monophasique	45
2.1.1	Equations de conservation	45
2.1.2	Equation d'état	47
2.1.3	Conservation de la masse : flux diffusif des espèces	48
2.1.4	Tenseur des contraintes visqueuses	49
2.1.5	Vecteur flux de chaleur	49
2.1.6	Coefficient de transport	50
2.1.7	Cinétique chimique	51
2.2	Equations de la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique - phase porteuse	54
2.2.1	Le principe de la LES	54
2.2.2	Equations filtrées pour les écoulements non réactifs	55
2.2.3	Modèles pour le tenseur des contraintes de sous-maille $\overline{\tau_{ij}}^t$:	58
2.2.4	Le modèle de flamme épaissie	60
2.3	Equations de la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique - phase dispersée	66

TABLE DES MATIÈRES

2.3.1	Filtrage des équations de la phase dispersée	66
2.3.2	Modèle pour le tenseur des contraintes de sous-maille $\overline{\tau_{p,ij}}^t$	67
2.3.3	Termes sources pour la phase gazeuse	68
2.3.4	Combustion et modification du terme d'évaporation	69

Chapitre 1

Modélisation mésoscopique des écoulements dispersés

Introduction

1.1 Stratégies pour la simulation d'un spray dilué

1.1.1 Introduction - particule isolée

Dans cette thèse, on s'intéresse à la dispersion d'un brouillard de gouttes ou de particules (*spray*)¹ dans une chambre de combustion. Dans cette partie, on n'évoque pas les phénomènes d'atomisations primaire et secondaire qui ont permis l'obtention du spray. De plus, par hypothèse, on considère que le spray est dilué, c'est-à-dire que la fraction volumique de gouttes est inférieure à environ 0,1%. Ceci permet de dire que le transfert de quantité de mouvement entre les deux phases est essentiellement à sens unique : du gaz (phase porteuse) vers les particules (phase dispersée). En outre, la dilution permet de s'affranchir de l'interaction complexe que sont les collisions entre les gouttes. Une seconde approximation consiste à considérer que les particules sont toutes sphériques et de densité ρ_p constante. En suivant ces hypothèses et en considérant un faible Reynolds particulaire, Maxey et Riley [?] ont réalisé un bilan des forces sur une particule isolée qui s'écrit :

$$m_p \frac{d\vec{v}_p}{dt} = \vec{F}_{p,1} + \vec{F}_{p,2} \quad (1.1)$$

où m_p est la masse de la particule, \vec{v}_p sa vitesse, $\vec{F}_{p,1}$ les forces que le gaz exercerait sur un élément de fluide situé à la place de la particule et $\vec{F}_{p,2}$ les forces qui résultent de la perturbation du champ de vitesse du gaz par la particule.

Février [?], Kaufmann [?] et Riber [?] détaillent l'ensemble de ces forces (traînée, poussée d'Archimède, force de masse ajoutée, d'histoire, portance...) avant de réaliser des simplifications, compte tenu des écoulements qui nous intéressent en particulier. De toutes les forces qu'ils énumèrent, seule la traînée est

¹Dans cette thèse, les mots particules et gouttes représentent le même objet physique.

conservée par la suite ². Celle-ci s'exprime comme suit :

$$\vec{F}_p = \frac{3}{4} \rho \frac{\pi d_p^3}{6} \frac{1}{d_p} C_d ||\vec{u}_{f@p} - \vec{v}_p|| (\vec{u}_{f@p} - \vec{v}_p) \quad (1.2)$$

et d_p est le diamètre de la particule considérée, C_d le coefficient de traînée et $\vec{u}_{f@p}$ la vitesse du fluide porteur à la position de la particule. On reviendra sur le calcul de la traînée un peu plus loin. On s'intéresse tout d'abord aux stratégies qu'on peut employer pour simuler la propagation d'un brouillard de gouttes ou de particules.

1.1.2 Méthodes Lagrangiennes

La première méthode qu'on considère ici est parfois appelée DPS (pour *Discrete Particle Simulation*). Elle est utilisée et rencontrée dans de nombreuses simulations gaz-particules (ou gouttes) allant des configurations académiques [?, ?, ?, ?, ?] à des géométries beaucoup plus complexes [?, ?, ?] et les domaines d'application sont très nombreux comme le soulignent Crowe et al [?]. Elle consiste à suivre chaque goutte d'un point de vue Lagrangien, en résolvant pour chacune la position $\vec{X}_p^{(k)}$ et $\vec{V}_p^{(k)}$ de la manière suivante :

$$\frac{dX_{p,i}^{(k)}}{dt} = V_{p,i}^{(k)} \quad (1.3)$$

$$\frac{dV_{p,i}^{(k)}}{dt} = F_{p,i}^{(k)} \quad (1.4)$$

A ces équations peuvent s'ajouter la variation de masse et de température, permettant ainsi de prendre en compte le phénomène d'évaporation, notamment. L'avantage majeur de cette méthode provient du fait qu'il n'est pas nécessaire d'ajouter une modélisation supplémentaire afin de tenir compte de la polydispersion ou du croisement de trajectoires. Dans le cadre d'écoulements turbulents, elle a été utilisée avec succès, couplée à des méthodes RANS, LES et DNS pour le gaz. Afin de réaliser le couplage entre les deux phases, il faut localiser les particules sur le maillage utilisé pour résoudre les équations du gaz. Pour ce faire, des algorithmes d'interpolation précis doivent être utilisés (afin d'éviter des phénomènes de diffusion numérique, notamment).

Le point dur de cette stratégie reste les calculs sur machines parallèles [?]. Suivre une particule passant d'un domaine attribué à un processeur à un autre contrôlé par un processeur différent reste difficile [?]. En outre, la décomposition du domaine de calcul ne suit pas les mêmes règles que pour la phase porteuse Eulérienne. Dans ce dernier cas, le temps de calcul sur une cellule ou sur un groupe de cellules donné ne dépend pas de la solution. Par contre, dans l'approche Lagrangienne, le nombre d'opérations va être fortement modifié en fonction du nombre de particules dans le domaine d'un processeur. Ainsi la charge de calcul peut être répartie inégalement entre les processeurs et dégrader l'efficacité globale. L'étape de décomposition du domaine de calcul et de répartition des tâches entre processeurs doit donc être répétée plusieurs fois pendant le calcul [?].

On note qu'il existe des méthodes Lagrangiennes dites *stochastiques*, permettant de limiter le nombre de

²On se place dans le cas où les particules sont plus petites que l'échelle de Kolmogorov et de masse volumique bien importante que le fluide porteur.

gouttes dans le calcul. L'idée est de représenter plusieurs particules ayant des propriétés similaires par une seule particule numérique. Le gain en temps de calcul est non négligeable. En revanche, un niveau de modélisation supplémentaire est alors nécessaire.

Enfin on termine ce paragraphe en évoquant les méthodes semi-lagrangiennes. Le but de cette stratégie est de construire des champs Eulériens pour décrire la phase dispersée. L'avancement en temps de t à $t + \Delta t$ est cependant réalisé selon un formalisme Lagrangien : on construit les trajectoires des particules arrivant à un noeud donné à $t + \Delta t$ afin de connaître leurs propriétés et en déduire, de ce fait, le champ Eulérien. L'avantage que présentent ces schémas est leur stabilité inconditionnelle et leur lien évident avec des méthodes de caractéristiques (cf le schéma de Courant-Isaacson-Rees). Leur précision dépend des méthodes d'interpolation utilisées pour calculer les propriétés associées aux particules au temps t [?].

1.1.3 Méthodes Eulériennes

L'autre grande catégorie de stratégie est associée au formalisme Eulérien. Il existe plusieurs formulations différentes mais l'idée de base est de représenter les propriétés de la phase dispersée par des champs Eulériens. On ne s'intéresse donc plus aux particules individuellement. Le nuage de gouttes est vu comme une phase continue. Parmi les diverses méthodes existantes, on en présente deux.

Filtrage volumique

Cette première formulation est aussi appelée méthode à deux fluides. On trouve une présentation et une discussion très détaillée dans la thèse de Kaufmann [?]. On part du principe que les équations de Navier-Stokes sont valables pour les deux phases (porteuse et dispersée). L'obtention des équations se fait en plusieurs étapes :

1. On multiplie toutes les équations (pour les deux phases) par une fonction indicatrice χ_ϕ . Celle-ci est égale à 1 dans une phase notée ϕ et nulle dans l'autre.
2. Application des relations de commutation entre dérivées et fonction indicatrice lorsque c'est possible.
3. L'opérateur de moyenne $\langle \cdot \rangle_\Omega = \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega \cdot \chi_\phi dV$ est appliqué sur un volume de contrôle Ω .
4. On modélise les termes non résolus.

On obtient par exemple pour la conservation de la masse et de la quantité de mouvement de la phase ϕ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_\phi \alpha_\phi + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_\phi \alpha_\phi U_{\phi,j} = S_{\alpha,\phi} \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_\phi \alpha_\phi U_{\phi,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_\phi \alpha_\phi U_{\phi,j} U_{\phi,i} = S_{u_i,\phi} \quad (1.6)$$

et $\alpha_\phi = \langle \chi_\phi \rangle_\Omega$ est la fraction volumique de la phase ϕ , ρ_ϕ la masse volumique et $U_{\phi,i}$ la vitesse moyenne ou filtrée au sens de Favre ($\alpha_\phi \rho_\phi U_{\phi,i} = \langle \rho_\phi u_\phi \chi_\phi \rangle_\Omega$). $S_{\alpha,\phi}$ et $S_{u_i,\phi}$ sont des termes à modéliser comprenant les effets de pression, de viscosité, d'échanges entre phases et des fluctuations d'échelles inférieures à Ω .

Filtrage statistique

La description du spray, du point de vue statistique, repose sur les mêmes idées que la théorie cinétique des gaz. Il s'agit de la stratégie sur laquelle repose la description de la phase dispersée dans AVBP et on la présente en détail dans la section suivante.

1.2 Méthode Eulérienne par moyennage statistique

1.2.1 Principes de la méthode

La méthode de description Eulérienne du spray utilisée dans cette thèse est basée sur les travaux de Février et Simonin [?, ?, ?]. Celle-ci repose sur une approche statistique. Les équations de conservation utilisées pour la phase dispersée sont obtenues à partir de l'intégration dans l'espace des phases d'une fonction de densité de probabilité (fdp) f_p normalisée par le nombre de particules présentes. Comme l'explique Février [?], cette fdp est construite à partir d'une notion de moyenne d'ensemble. On considère la fonction $W_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p \vec{x}, t)$ telle que :

$$W_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p \vec{x}, t) = \delta(\vec{x} - \vec{x}_p(t)) \delta(\vec{c}_p - \vec{v}_p(t)) \delta(\zeta_p - T_p(t)) \delta(\mu_p - m_p(t)) \quad (1.7)$$

où δ est la distribution de Dirac, c'est-à-dire :

$$\delta(\phi - \phi_p(t)) = 1 \quad \text{si} \quad \phi = \phi_p(t) \quad (1.8)$$

$$\delta(\phi - \phi_p(t)) = 0 \quad \text{sinon} \quad (1.9)$$

On se place dans le cas où la turbulence de la phase porteuse n'est pas modifiée par les particules (écoulements dilués). Pour une réalisation donnée du champ porteur notée \mathcal{H}_f , on peut avoir \mathcal{N}_p réalisations différentes du champ de particules. En utilisant la fonction $W_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p \vec{x}, t)$, on peut alors définir une fonction de densité de probabilité \check{f}_p conditionnée par la réalisation \mathcal{H}_f dont la définition est :

$$f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) = \langle W_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p, \vec{x}, t) | \mathcal{H}_f \rangle \quad (1.10)$$

où l'opérateur $\langle \cdot | \mathcal{H}_f \rangle$ est la moyenne arithmétique sur l'ensemble des \mathcal{N}_p particules et sur un grand nombre \mathcal{N}_p de réalisations du champ des particules \mathcal{H}_p , ce qui s'écrit :

$$f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) = \lim_{\mathcal{N}_p \rightarrow +\infty} \left[\frac{1}{\mathcal{N}_p} \sum_{\mathcal{N}_p} \sum_{m=1}^{\mathcal{N}_p} W_p^{(m)}(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p(\vec{x}, t) | \mathcal{H}_f) \right] \quad (1.11)$$

où $f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f)$ est la fdp "sachant" la réalisation \mathcal{H}_f , et $f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p d\vec{x}$ représente le nombre de particules, à l'instant t ayant une position \vec{x}_p , une vitesse \vec{v}_p , une température T_p et une masse m_p telles que : $\vec{x} \leq \vec{x}_p \leq \vec{x} + d\vec{x}$, $\vec{c}_p \leq \vec{v}_p \leq \vec{c}_p + d\vec{c}_p$, $\zeta_p \leq T_p \leq \zeta_p + d\zeta_p$ et $\mu_p \leq m_p \leq \mu_p + d\mu_p$.

1.2.2 Equation de transport de la fdp

L'évolution spatio-temporelle de la densité de probabilité conditionnée décrite dans la section précédente suit une équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} c_{p,j} f_p = - \frac{\partial}{\partial c_{p,j}} \left[\frac{du_{p,j}}{dt} f_p \right] - \frac{\partial}{\partial \zeta_p} \left[\frac{dT_p}{dt} f_p \right] - \frac{\partial}{\partial \mu_p} \left[\frac{dm_p}{dt} f_p \right] + \left(\frac{\partial f_p}{\partial t} \right)_{coll} \quad (1.12)$$

Le terme $\frac{\partial}{\partial t}$ correspond à la dérivée le long du chemin suivi par la particule p . Il correspond à la variation de la propriété considérée, causée par les effets des forces extérieures qui s'exercent sur la particule p et des échanges avec la phase porteuse. Les trois premiers termes du membre de droite de l'équation (1.12) correspondent à la variation de f_p dues aux forces extérieures et aux échanges. Le dernier terme modélise les interactions entre les particules (frottements, collisions, fractionnement, atomisation,...).

1.2.3 Moyennes dans l'espace des phases

L'équation de transport pour un moment de la fdp f_p s'obtient en multipliant (1.12) par la grandeur $\psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p)$ puis en intégrant l'équation obtenue dans l'espace des phases. La moyenne de phase de la fonction $\psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p)$ est définie par :

$$\langle \psi \rangle_p = \frac{1}{\check{n}_p} \int \psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p) f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.13)$$

et \check{n}_p est le nombre de particules par unité de volume. Celui s'obtient en moyennant la fdp sur l'ensemble des réalisations possibles, soit :

$$\check{n}_p = \int f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.14)$$

La moyenne de phase de $\psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p)$ représente la moyenne de ψ sur l'ensemble des réalisations possibles de la phase dispersée (connaissant la réalisation de la phase gazeuse). Comme le poids m_p des particules (les particules peuvent être des gouttes s'évaporant par exemple) peut varier, on introduit une deuxième moyenne par analogie avec la moyenne de Favre :

$$\check{\psi} = \langle \psi \rangle_p = \frac{1}{\rho_p \check{\alpha}_p} \int \mu_p \psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p) f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.15)$$

avec ρ_p la masse volumique des particules et $\check{\alpha}_p$ la fraction volumique de liquide. Celle-ci est définie par :

$$\rho_p \check{\alpha}_p = \check{n}_p \{m_p\}_p = \int \mu_p f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f) d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.16)$$

Comme le rappelle Riber [?], le produit $\psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p) f_p(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p; \vec{x}, t | \mathcal{H}_f)$ doit toujours être fini et tendre vers zéro aux limites du domaine d'intégration.

1.2.4 Equation de Enskog généralisée

Après multiplication de (1.12) par $\psi(\vec{c}_p, \zeta_p, \mu_p)$ puis intégration dans l'espace des phases, on obtient l'équation d'Enskog généralisée qui décrit l'évolution de la grandeur mésoscopique $\check{\psi}$ et s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_p \check{\alpha}_p \langle \psi \rangle_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \langle u_{p,j} \psi \rangle_p &= \mathbb{C}(m_p \psi) \\ &+ \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{du_{p,j}}{dt} \frac{\partial \psi}{\partial u_{p,j}} \right\rangle_p + \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{dT_p}{dt} \frac{\partial \psi}{\partial T_p} \right\rangle_p \\ &+ \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{dm_p}{dt} \left(\frac{\partial \psi}{\partial m_p} + \frac{\psi}{m_p} \right) \right\rangle_p \end{aligned} \quad (1.17)$$

Le terme collisionnel $\mathbb{C}(m_p \psi)$ correspond à la variation de $\rho_p \check{\alpha}_p \check{\psi}$ dues aux variations de $m_p \psi$ lors de collisions.

En appliquant le principe fondamental de la dynamique aux particules, on obtient :

$$\left\langle \frac{du_{p,j}}{dt} \right\rangle_p = \left\langle \frac{F_{p,j}}{m_p} \right\rangle_p \quad (1.18)$$

\vec{F}_p sont les forces extérieures qui agissent sur les particules. Dans les cas qu'on considère, comme on l'a dit précédemment, on ne tient compte que de la traînée, soit :

$$F_{p,j} = \frac{1}{\tau_p} (u_{p,j} - u_j) \quad (1.19)$$

où u_j est la vitesse du fluide (qu'on avait noté $\vec{u}_{f@p}$ dans l'expression (1.2)) et τ_p un temps de relaxation³.

L'équation d'Enskog (1.17) devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_p \check{\alpha}_p \langle \psi \rangle_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \langle u_{p,j} \psi \rangle_p &= \mathbb{C}(m_p \psi) - \frac{\check{n}_p}{\check{\tau}_p} \left\langle (u_{p,j} - u_j) \frac{\partial \psi}{\partial u_{p,j}} \right\rangle_p \\ &+ \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{dT_p}{dt} \frac{\partial \psi}{\partial T_p} \right\rangle_p \\ &+ \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{dm_p}{dt} \left(\frac{\partial \psi}{\partial m_p} + \frac{\psi}{m_p} \right) \right\rangle_p \end{aligned} \quad (1.20)$$

Enfin, si la fonction ψ dépend aussi de l'espace et du temps, alors on ajoute dans le membre de droite de (1.17) et (1.20) :

$$\rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\rangle_p + \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial x_j} \right\rangle_p \quad (1.21)$$

³Celui-ci sera défini à partir des vitesses corrélées dans la suite. On ajoutera de ce fait le symbole $\check{\tau}$ quand on y fera référence.

1.2.5 Notions de grandeurs mésoscopiques et de mouvement décorrélé (RUM)

Les quantités mésoscopiques, définies comme dans l'équation (1.16), correspondent à la moyenne sur l'ensemble des réalisations possibles de la phase dispersée, connaissant la réalisation de la phase porteuse. Elles permettent de décrire la dynamique d'ensemble des particules. Afin de décrire les fluctuations de la dynamique par rapport au mouvement d'ensemble, on introduit aussi les grandeurs relatives au mouvement décorrélé (en anglais RUM, *Random Uncorrelated Motion*, rien à voir avec la boisson). La figure (1.1) présente les deux concepts. On définit ainsi :

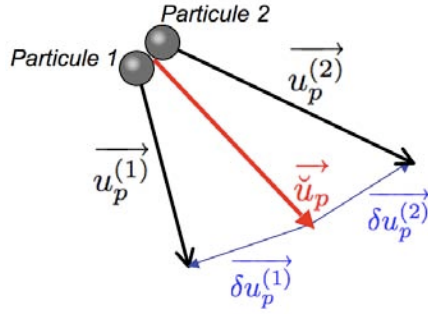


FIG. 1.1 - Schéma présentant le mouvement de deux particules et mettant ainsi le mouvement corrélé mésoscopique (moyen ou d'ensemble) et le mouvement décorrélé (écart par rapport au mouvement d'ensemble).

- la vitesse corrélée ou mésoscopique dont les composantes sont notées $\check{u}_{p,j}$

$$\check{u}_{p,j}(\vec{x}, t | \mathcal{H}_f) = \langle u_{p,j} \rangle_p = \frac{1}{\rho_p \check{\alpha}_p} \int \mu_p c_{p,j} f_p d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.22)$$

- la vitesse décorrélée $\delta \check{u}_{p,j}$ (en anglais *Random Uncorrelated Velocity*)

Pour chaque particule notée (k) , on peut décomposer la vitesse Lagrangienne en deux contributions :

$$u_{p,j}^{(k)}(t) = \check{u}_{p,j}(\vec{x}_p^{(k)}(t), t | \mathcal{H}_f) + \delta u_{p,j}^{(k)}(t) \quad (1.23)$$

On note que seule la vitesse mésoscopique est définie comme une grandeur Eulérienne, puisque c'est une vitesse qui concerne l'ensemble des particules. A l'inverse, les vitesses Lagrangiennes et décorrélées sont relatives à la particule (k) . Par définition, on a :

$$\langle \delta u_{p,j} \rangle_p = 0$$

- Pour décrire les fluctuations de vitesse, on utilise donc le tenseur des vitesses décorrélées défini par :

$$\delta \check{R}_{p,ij}(\vec{x}, t | \mathcal{H}_f) = \langle \delta u_{p,i} \delta u_{p,j} \rangle_p = \frac{1}{\rho_p \check{\alpha}_p} \int \mu_p [c_{p,i} - \check{u}_{p,i}] [c_{p,j} - \check{u}_{p,j}] f_p d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.24)$$

Moreau [?] et Riber [?] décrivent les équations de transport pour les 6 composantes du tenseur (il est symétrique), ainsi que le transport de $\delta \check{S}_{p,ijk}$, qui correspond au troisième moment des vitesses des particules et qui s'écrit :

$$\begin{aligned} \delta \check{S}_{p,ijk}(\vec{x}, t | \mathcal{H}_f) &= \langle \delta u_{p,i} \delta u_{p,j} \delta u_{p,k} \rangle_p \\ &= \frac{1}{\rho_p \check{\alpha}_p} \int \mu_p [c_{p,i} - \check{u}_{p,i}] [c_{p,j} - \check{u}_{p,j}] [c_{p,k} - \check{u}_{p,k}] f_p d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \end{aligned} \quad (1.25)$$

Pour des raisons de contraintes, au niveau du temps de calcul, les équations liées au tenseur des vitesses décorréliées ne sont pas résolues dans AVBP. Pour donner une description des vitesses décorréliées, on utilise la grandeur suivante :

- Energie du mouvement décorrélé (en anglais *RUE : Random Uncorrelated Energy*) notée $\delta\check{\theta}_p$.
Il s'agit d'une grandeur introduite par Simonin et al [?]. Elle correspond à la moitié de la trace du tenseur $\delta\check{R}_{p,ij}$, soit :

$$\delta\check{\theta}_p = \frac{1}{2}\delta\check{R}_{p,kk} = \frac{1}{2}\langle\delta u_{p,k}\delta u_{p,k}\rangle \quad (1.26)$$

- On va étudier des écoulements diphasiques dans lesquels les gouttes sont susceptibles de s'évaporer. Pour décrire la température au sein de celles-ci, on introduit l'enthalpie sensible mésoscopique notée $\check{h}_{s,p} = C_{p,p}\check{T}_p$ et égale à :

$$\check{h}_{s,p}(\vec{x}, t|\mathcal{H}_f) = \langle C_{p,p}T_p \rangle_p = \frac{1}{\rho_p\check{\alpha}_p} \int \mu_p C_{p,p} \zeta_p f_p d\vec{c}_p d\zeta_p d\mu_p \quad (1.27)$$

- L'enthalpie sensible décorrélée est donc la suivante : $\delta h_{s,p} = C_{p,p}\delta T_p$ et on peut écrire :

$$\delta h_{s,p} = h_{s,p} - \check{h}_{s,p} \quad \text{et} \quad \langle \delta h_{s,p} \rangle_p = 0$$

1.2.6 Equations de conservation

On écrit maintenant les équations de conservation à partir de l'équation d'Enskog (1.20) en remplaçant ψ par la quantité désirée.

- *Conservation du nombre de particules :*
On pose ici $\psi = \frac{1}{\mu_p}$ et on obtient :

$$\frac{\partial \check{n}_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \check{n}_p \check{u}_{p,j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \check{n}_p \{\delta u_{p,j}\}_p + \mathbb{C}(1) \quad (1.28)$$

Dans cette thèse, on n'a étudié que les écoulements monodisperses. Concrètement, cela signifie que dans un volume de contrôle (qu'on définira plus tard) dans lequel sont discrétisées les équations, les gouttes ont un diamètre unique. Ainsi la moyenne statistique $\{m_p\}_p$ est une constante et le terme $\check{n}_p \{\delta u_{p,j}\}_p$ s'annule.

- *Conservation de la fraction volumique :*
On pose $\psi = 1$ et on a :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_p \check{\alpha}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \check{u}_{p,j} = \check{n}_p \left\{ \frac{dm_p}{dt} \right\}_p + \mathbb{C}(m_p) \quad (1.29)$$

Il convient en outre de noter que dans un calcul monodisperse, on a :

$$\check{\alpha}_p = \check{n}_p \frac{\pi \check{d}^3}{6} \quad (1.30)$$

où \check{d} est le diamètre des particules.

- *Conservation de la quantité de mouvement :*

On pose $\psi = \check{u}_{p,i}$ et on a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_p \check{\alpha}_p \check{u}_{p,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \check{u}_{p,i} \check{u}_{p,j} &= - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{R}_{p,ij}^* - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{\theta}_p \\ &\quad - \frac{\rho_p \check{\alpha}_p}{\check{\tau}_p} (\check{u}_{p,i} - u_i) \\ &\quad + \check{n}_p \left\{ \frac{dm_p}{dt} \check{u}_{p,i} \right\}_p + \mathbb{C}(m_p \check{u}_{p,i}) \end{aligned} \quad (1.31)$$

Le terme $-\frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{\theta}_p$ est parfois assimilé dans les cas monodisperses à un terme de pression en écrivant [?] :

$$\check{p}_{RUM} = \frac{2}{3} \check{n}_p \delta \check{\theta}_p,$$

et en utilisant la relation (1.30).

- *Conservation de l'énergie du mouvement décorrélé :*

On choisit ici $\psi = \frac{1}{2} (c_{p,i} - \check{u}_{p,i}) (c_{p,i} - \check{u}_{p,i})$. Comme dans le cas présent, ψ dépend de l'espace et du temps, alors on utilise l'équation (1.20) à laquelle on ajoute les termes (1.21). Après calcul, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{\theta}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{\theta}_p \check{u}_{p,j} &= - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} \delta \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{S}_{p,ij} - \frac{2}{3} \frac{\check{\theta}_p}{\check{\tau}_p} \\ &\quad - \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{R}_{p,ij}^* \frac{\partial}{\partial x_j} \check{u}_{p,i} - \frac{2}{3} \rho_p \check{\alpha}_p \delta \check{\theta}_p \frac{\partial}{\partial x_j} \check{u}_{p,j} \\ &\quad + \check{n}_p \left\{ \frac{1}{2} \frac{dm_p}{dt} \delta u_{p,i} \delta u_{p,i} \right\}_p + \mathbb{C}(\frac{1}{2} m_p \delta u_{p,i} \delta u_{p,i}) \end{aligned} \quad (1.32)$$

Dans les équations (1.31) et (1.32), $\delta \check{R}_{p,ij}^*$ est la partie déviatrice du tenseur des vitesses décorrélées. Celui-ci est modélisé puisqu'il n'est pas transporté. Le modèle intégré dans AVBP est basé sur une hypothèse d'équilibre local du tenseur des vitesses décorrélées (moment d'ordre 2) et en négligeant toute contribution des moments d'ordre supérieur. En supposant, en outre, que la partie déviatrice de $\delta \check{R}_{ij}$ est petite devant la partie sphérique, alors on peut modéliser ce tenseur par un terme visqueux [?, ?] :

$$\delta \check{R}_{p,ij}^* = \nu_{RUM} \left(\frac{\partial \check{u}_{p,j}}{\partial x_i} + \frac{\partial \check{u}_{p,i}}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial \check{u}_{p,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (1.33)$$

où ν_{RUM} est une viscosité liée au mouvement décorrélé et qui s'écrit :

$$\nu_{RUM} = \frac{\check{\tau}_p}{3} \delta \check{\theta}_p$$

Il faut d'autre part modéliser la contribution du 3^{eme} moment $\delta \check{S}_{p,ijk}$. Kaufman [?] propose de le modéliser par analogie à la loi de Fick et :

$$\delta \check{S}_{p,ijj} = -\kappa_{RUM} \frac{\partial}{\partial x_j} \delta \check{\theta}_p$$

où κ_{RUM} est un coefficient de diffusion écrit par Simonin [?] :

$$\kappa_{RUM} = \frac{10}{27} \check{\tau}_p \delta \check{\theta}_p$$

- *Conservation de l'enthalpie sensible corrélée :*

On pose $\psi = C_{p,p}\zeta_p$. On obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_p \check{\alpha}_p \check{h}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \check{h}_p \check{u}_{p,j} &= - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \check{\alpha}_p \langle \delta h_{s,p} \delta \check{u}_{p,j} \rangle_p - \rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{dh_{s,p}}{dt} \right\rangle_p \\ &+ \check{n}_p \left\{ \frac{dm_p}{dt} \check{h}_p \right\}_p + \mathbb{C}(m_p \check{h}_p) \end{aligned} \quad (1.34)$$

Nature des équations

Kaufmann [?] a étudié le système d'équations obtenu précédemment dans un cas monodisperse, monodimensionnel, sans termes sources, de couplage ou visqueux. Après simplification, on obtient alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_p + \frac{\partial}{\partial x} \check{n}_p \check{u}_p = 0 \quad (1.35)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_p \check{u}_p + \frac{\partial}{\partial x} \check{n}_p \check{u}_p \check{u}_p = - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \check{n}_p \delta \check{\theta}_p \quad (1.36)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \check{n}_p \delta \check{\theta}_p + \frac{\partial}{\partial x} \check{n}_p \delta \check{\theta}_p \check{u}_p = - \frac{2}{3} \check{n}_p \delta \check{\theta}_p \frac{\partial}{\partial x} \check{u}_p \quad (1.37)$$

Par analogie avec les équations d'Euler, Kaufmann [?] interprète le terme de droite des équations (1.36) et (1.37) comme une pression $\check{p}_{RUM} = \frac{2}{3} \check{n}_p \delta \check{\theta}_p$ puis introduit par analogie avec la phase gazeuse une vitesse de propagation similaire à la vitesse de son c :

$$\check{c}_p = \sqrt{\frac{10}{9} \delta \check{\theta}_p}.$$

Ainsi les valeurs propres du système (1.35)-(1.37) s'écrivent :

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \check{u}_p + \check{c}_p \\ \lambda_2 &= \check{u}_p \\ \lambda_3 &= \check{u}_p - \check{c}_p \end{aligned}$$

Les valeurs propres étant réelles et différentes, on a donc un système hyperbolique strict, très proche des équations d'Euler. Il convient d'ailleurs de faire une remarque supplémentaire. Si les particules sont incompressibles (par exemple des gouttes de kérosène), le comportement mésoscopique de la phase discrète ne l'est pas du tout. Le mouvement d'ensemble des gouttes a, au contraire, des similitudes avec un écoulement fortement compressible [?, ?] et la formation d'amas de particules fait penser à des chocs. En outre, on a très souvent : $|\check{u}_p| \gg \check{c}_p$.

Ainsi, il paraît envisageable d'utiliser les méthodes de résolution classiques employées pour la simulation des écoulements compressibles [?], comme on y reviendra plus tard.

1.2.7 Termes d'échange entre les phases et modèles

Dans cette thèse, on réalise des simulations d'écoulements diphasiques dans les chambres de combustion. Les particules sont donc des gouttes et on présente ici les modèles utilisés pour fermer les termes d'échange à l'interface. Ceux-ci sont obtenus sous les hypothèses suivantes :

- La température est homogène dans une particule, ce qui équivaut à supposer que la conductivité est infinie.
- Ici la gravité est négligée.
- Comme on l’a évoqué précédemment, toutes les gouttes possèdent localement le même diamètre : le spray est monodisperse.
- Toutes les gouttes ont localement la même température.

Echange de masse

Les termes de variation d’une quantité mésoscopique $\check{\psi}$ due à un transfert de masse sont notés dans les équations (1.28) à (1.34) :

$$\check{\Gamma}_{p,\psi} = \check{n}_p \left\{ \frac{dm_p}{dt} \psi \right\}_p \quad (1.38)$$

Dans l’approche monodisperse choisie ici, les seules variations de masse des particules sont dues à l’évaporation. Ainsi, le terme $\check{\Gamma}_{p,\psi}$ représente le flux convectif de $\check{\psi}$ dû au changement de phase. Il s’exprime à partir du flux de masse liquide évaporé $\check{\Gamma} = -\check{n}_p \left\{ \frac{dm_p}{dt} \right\}_p$:

$$\check{\Gamma}_{p,\psi} = -\check{\psi} \check{\Gamma} \quad (1.39)$$

On suppose en outre que les gouttes sont sphériques. Le transfert de masse est donc modélisé par la loi de Spalding [?], valable pour une goutte isolée et sphérique :

$$\check{\Gamma} = \check{\alpha}_p \frac{6}{d_p^2} Sh(\rho D_k) \ln(1 + B_M) \quad (1.40)$$

où ρ est la masse volumique de la phase porteuse, D_k est la diffusivité de la k -ième espèce du mélange gazeux (qui constitue la goutte sous forme gazeuse). Le nombre de Sherwood Sh est défini par :

$$Sh = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Sc_k^{1/2} \quad (1.41)$$

avec $Re_p = \frac{\check{d}_p ||\vec{u}_p - \vec{u}||}{\nu}$ le nombre de Reynolds des particules, où ν est la viscosité cinématique de la phase porteuse, et Sc_k le nombre de Schmidt de l’espèce k et $Sc_k = \frac{\nu}{D_k}$.

Le nombre de masse ou nombre de Spalding B_M est égal à :

$$B_M = \frac{Y_{k,\Sigma} - Y_{k,\infty}}{1 - Y_{k,\Sigma}} \quad (1.42)$$

où Y_k est la fraction massique de l’espèce k , l’indice Σ indique une valeur prise à l’interface liquide-gaz et ∞ désigne la valeur loin de la goutte. La grandeur $Y_{k,\Sigma}$ est calculée de la manière suivante :

$$Y_{k,\Sigma} = p_{k,\Sigma} W_k \frac{\sum_{j \neq k} Y_j / W_j}{(1 - Y_k)(p - p_{k,\Sigma}) + p_{F,\Sigma} W_k \sum_{j \neq k} Y_j / W_j} \quad (1.43)$$

où W_j est la masse molaire de l'espèce j , p la pression dans la phase porteuse et $p_{k,\Sigma}$ est la pression partielle de l'espèce k à l'interface définie par l'équation de Clasius-Clapeyron :

$$p_{k,\Sigma} = p_{CC} \exp \left(\frac{W_k \Delta H}{R} \left(\frac{1}{T_{CC}} - \frac{1}{\check{T}_p} \right) \right) \quad (1.44)$$

où p_{CC} et T_{CC} représentent la pression et la température de référence correspondant aux conditions de saturation, ΔH est la chaleur latente de vaporisation et R est la constante des gaz.

On a donc, dans les équations considérées, les termes sources suivants :

- *Conservation de la fraction volumique :*

$$\check{\Gamma}_{p,1} = -\Gamma$$

- *Conservation de la quantité de mouvement :*

$$\overrightarrow{\check{\Gamma}}_{p,\vec{c}_p} = -\Gamma \vec{u}$$

- *Conservation de l'enthalpie mésoscopique :*

$$\check{\Gamma}_{p,\zeta_p} = -\Gamma \check{h}_{s,p}$$

Conduction de l'enthalpie

Le terme d'échange d'enthalpie du liquide vers le gaz par conduction est dû au gradient de température à l'interface. Dans l'équation d'enthalpie sensible mésoscopique (1.34), il correspond à $-\rho_p \check{\alpha}_p \left\langle \frac{dh_{s,p}}{dt} \right\rangle_p$.

$$\Phi(T_{p,\Sigma}) = \check{\alpha}_p \lambda Nu \frac{6}{d_p^2} (T_{p,\Sigma} - T) \quad (1.45)$$

avec Nu correspond au nombre de Nusselt dans la phase gazeuse, λ au coefficient de conductivité dans la phase porteuse. On fait ici l'hypothèse que le nombre de Lewis est unitaire, on a donc : $Sh = Nu$.

Traînée

On se place toujours dans le cas d'un écoulement monodisperse. Le temps de relaxation $\check{\tau}_p$ des particules supposées sphériques est calculé en fonction du coefficient de traînée. On a alors :

$$\check{\tau}_p = \frac{4}{3} \frac{\rho_p \check{d}_p^3}{\rho \nu} \frac{1}{C_d Re_p} \quad (1.46)$$

C_d est le coefficient de traînée de la goutte et se calcule de la manière suivante :

$$C_d = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) \quad \text{pour} \quad Re_p < 1000 \quad (1.47)$$

$$C_d = 0.438 \quad \text{pour} \quad Re_p \geq 1000 \quad (1.48)$$

et l'équation (1.47) provient de la loi empirique de Schiller et Nauman [?].

1.2.8 Simplifications pour la suite et discussion

Traînée et couplage inverse

On rappelle deux des hypothèses majeures qui ont permis d'écrire les équations de conservation pour la phase dispersée :

- L'écoulement est dilué ($\alpha_p < 10^{-2}$). Les effets d'encombrement volumique des particules dans la phase porteuse sont négligés soit $1 - \alpha_p \simeq 1$.
- La conséquence de l'hypothèse précédente est qu'on suppose qu'il n'y a pas d'interaction entre les gouttes (collisions et tous les phénomènes qui en découlent comme la rupture ou la coalescence). Tous les termes \mathbb{C} sont donc nuls.
- La phase porteuse n'est pas (ou peu) altérée par le spray, d'où l'utilisation d'une *fdp* conditionnée par la réalisation \mathcal{H}_f .

A partir d'une fraction volumique α_p d'environ 10^{-4} , il existe un couplage inverse de la traînée, c'est-à-dire de la phase dispersée vers la phase porteuse. Tant que ce terme n'induit que de faibles perturbations sur le gaz, il n'est pas nécessaire de changer le raisonnement mené jusqu'ici. En revanche, si le couplage est plus fort, il est alors nécessaire de redéfinir tout le cadre de travail et utiliser une *fdp* jointe gaz-particule [?].

Mouvement décorrélé

Compte tenu de l'avancement actuel de la modélisation du mouvement décorrélé, on a choisi de ne pas en tenir compte dans les simulations réalisées dans cette thèse. En effet, si les résultats obtenus par Riber [?] confirment la pertinence des modèles liés au mouvement décorrélé dans le cas d'une THI, il n'en est plus de même dans des cas de jets diphasiques turbulents et confinés. En effet, le terme $\check{R}_{p,ij}^*$ modélisé par un terme visqueux est surestimé dans les zones de forts gradients moyens de vitesses mésoscopiques corrélées. Ce problème n'apparaissait pas dans la THI puisqu'il n'y a pas de gradients moyens. Un filtrage passe-haut (à la manière du calcul de la viscosité turbulente dans le modèle de Smagorinsky filtré - voir section 2.2.3) pourrait réduire la quantité de diffusion introduite par le modèle en supprimant la composante moyenne des gradients de vitesses corrélées et rendant ainsi le calcul de $\check{R}_{p,ij}^*$ plus local. Ce test n'a pas cependant été mené dans cette thèse.

Polydispersion

Dans une chambre de combustion, la polydispersion influence fortement le mélange turbulent d'un carburant injecté sous forme liquide (dans la dispersion puis l'évaporation des gouttes) [?]. Tout d'abord, les gouttes ne suivent pas la même trajectoire en fonction de leur taille. Le nombre de Stokes permet de

comparer les temps caractéristiques de convection τ_{conv} et de traînée τ_p :

$$St = \frac{\tau_{conv}}{\tau_p} \quad (1.49)$$

Il est commun de dire que pour un nombre de Stokes très inférieur à 1, les gouttes se comportent comme des traceurs et, à l'inverse, pour un nombre Stokes grand devant 1, étant très inertielles, elles ont tendance à suivre leurs propres trajectoires, peu influencées par l'écoulement porteur. De ce fait, si la granulométrie est très étalée, on peut s'attendre à des comportements très différents. En outre, l'évaporation est très différente selon les tailles des gouttes. Les petites gouttes s'évaporent beaucoup plus vite que les grosses, qui peuvent être vues comme des réservoirs de fuel.

Il existe un modèle implanté dans AVBP permettant la description de gouttes de diamètres différents au sein d'un même volume de contrôle. Celui-ci a été introduit par Mossa [?] et repose sur une *fdp* avec une répartition présumée des diamètres des gouttes. La construction de la *fdp* nécessite, par ailleurs, le transport d'une seule équation supplémentaire (densité de surface de liquide). Cette méthodologie, pour accéder à la polydispersion, a montré des résultats intéressants concernant la distribution du carburant dans une chambre de combustion réelle. Les effets de ségrégation par la traînée sont bien capturés, au moins qualitativement. Cependant, il semble que cette modélisation reste problématique en cas d'évaporation et les calculs très peu stables. Or dans cette thèse, le but est de réaliser la LES d'un écoulement diphasique réactif, c'est pourquoi ce modèle ne sera pas utilisé.

Certaines alternatives existent pour traiter à la fois l'évaporation et la polydispersion [?, ?]. A ce titre, la méthode multi-fluide dont les principes sont rappelés dans [?] (limitation aux moments d'ordre 0 et 1 de la vitesse, discrétisation dans l'espace des phases des tailles de gouttes) permet d'obtenir de très bons résultats en comparaison des méthodes lagrangiennes. Il lui reste, tout de même, un défaut qu'on évoque au paragraphe suivant et qui va permettre d'introduire une dernière méthode Eulérienne, toujours très proche des précédentes.

Croisements de jets

Les LES diphasiques réalisées avec AVBP dans des configurations complexes (y compris celle présentée à la fin de cette thèse) sont réalisées SANS utiliser les modèles liés au mouvement décorrélié. Si on se réfère à l'équation (1.31), cela revient à supprimer, non seulement, un terme visqueux (ce qui rend la résolution plus ardue car on enlève une partie stabilisatrice), mais aussi et surtout, à enlever un terme de pression. On obtient donc, au même titre que la méthode multi-fluide, une équation proche de l'équation de Burgers non linéaire et non visqueuse. Par ailleurs, l'étude du paragraphe 1.2.6 indique que le système obtenu (l'équation de transport de l'énergie du mouvement décorrélié a disparu) est désormais hyperbolique non strict. Le système correspond aux équations de description d'un gaz sans pression qui peut faire apparaître des δ -chocs, c'est-à-dire des singularités dans la solution (le nombre de gouttes ou la fraction volumique peuvent tendre vers l'infini !).

Ce problème apparaît car le système ne permet pas le croisement de particules, ne considérant en un point qu'une vitesse à la fois et montre l'intérêt de la prise en compte du mouvement décorrélié. Il existe des corrections permettant d'introduire un terme assimilable à une pression dans l'équation de quantité de mouvement de la phase dispersée (voir Février [?] ou Kaufmann [?]) et permettant de s'affranchir d'une équation de transport supplémentaire mais ça n'est toutefois pas toujours suffisant.

On évoque donc ici une dernière approche Eulérienne pour décrire la phase dispersée nommée DQ-MOM (pour *direct quadrature method of moments*). Celle-ci consiste à approximer la fdp par une somme de distribution de Dirac dans l'espace des phases [?, ?] et permet d'écrire les différents moments (des vitesses, des tailles de gouttes...) sous forme de quadratures comme suit :

$$\langle V_p^k u_p^l v_p^m w_p^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} V_p^k u_p^l v_p^m w_p^n f_p(V_p, \vec{u}_p) dV_p d\vec{u}_p \quad (1.50)$$

$$\simeq \sum_{i=1}^N \omega_i V_{p,i}^k u_{p,i}^l v_{p,i}^m w_{p,i}^n \quad (1.51)$$

où V_p est le volume des particules, k, l, m, n sont des entiers positifs et ω_i sont des poids. Cette méthode, bien qu'assez complexe à mettre en place, permet, entre autres, de considérer plusieurs vitesses en une position donnée et d'éviter ainsi le problème des δ -chocs.

Chapitre 2

LES de la combustion diphasique

2.1 Equations de la combustion laminaire et monophasique

Le chapitre 1 a décrit une formulation pour la phase dispersée en écoulement diphasique. On présente ici l'ensemble des équations pour la phase dispersée et le gaz ainsi que leur filtrage en LES. Dans un premier temps, on décrit les équations de Navier-Stokes pour les fluides compressibles sous forme conservative (comme on peut les trouver dans les livres classiques tels que [?, ?]). Ces équations sont non filtrées, telles qu'elles sont utilisées pour réaliser des simulations numériques directes.

2.1.1 Equations de conservation

Dans ce chapitre, on utilise les notations indicielles pour décrire les équations régissant le mouvement des fluides compressibles, en adoptant la règle de sommation d'Einstein (l'indice d'une variable apparaissant deux fois dans un terme sous-entend la sommation sur toutes les valeurs que peut prendre cet indice). On notera cependant que l'indice k est réservé pour désigner la k -ième espèce et ne suit pas cette règle (sauf si on indique le contraire).

L'ensemble des équations de conservation décrivant l'évolution d'un écoulement compressible avec réactions chimiques s'écrit :

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [p \delta_{ij} - \tau_{ij}], \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho E u_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [u_i (p \delta_{ij} - \tau_{ij}) + q_j] + \dot{\omega}_T + Q_r, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_k u_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [J_{j,k}] + \dot{\omega}_k. \quad (2.3)$$

Les équations (2.1)-(2.3) traduisent respectivement la conservation de la quantité de mouvement (vecteur ρu_i), de l'énergie totale (ρE) et des densités partielles des espèces ($\rho_k = \rho Y_k$, pour $k = 1, \dots, N$ et N est ici le nombre d'espèces), avec ρ la masse volumique du mélange. Le terme source dans l'équation de l'énergie totale, (Eq. 2.2), est décomposé en un terme source chimique et un terme de radiation. Ce

dernier n'étant pas utilisé dans cette thèse, on ne reviendra pas sur son expression et on aura désormais $Q_r = 0$.

Il est courant de décomposer le tenseur des flux en une partie convective et une partie visqueuse. On introduit en outre le vecteur : $\mathbf{U} = (\rho u, \rho v, \rho w, \rho E, \rho_k)^T$, qui permettra (voir partie II) d'écrire les équations de manière compacte et de décrire plus aisément les méthodes numériques :

Termes convectifs ou non visqueux :

$$\mathbf{F}^C = \begin{pmatrix} \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ \rho Eu + p u \\ \rho_k u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}^C = \begin{pmatrix} \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ \rho Ev + p v \\ \rho_k v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}^C = \begin{pmatrix} \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ \rho Ew + p w \\ \rho_k w \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

où la pression hydrostatique p est donnée par l'équation d'état pour un gaz parfait (Eq. 2.13).

Termes visqueux :

Les composantes des tenseurs des flux visqueux ont la forme suivante :

$$\mathbf{F}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xx} \\ -\tau_{xy} \\ -\tau_{xz} \\ -(u \tau_{xx} + v \tau_{xy} + w \tau_{xz}) + q_x \\ J_{x,k} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{G}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xy} \\ -\tau_{yy} \\ -\tau_{yz} \\ -(u \tau_{xy} + v \tau_{yy} + w \tau_{yz}) + q_y \\ J_{y,k} \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{H}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{xz} \\ -\tau_{yz} \\ -\tau_{zz} \\ -(u \tau_{xz} + v \tau_{yz} + w \tau_{zz}) + q_z \\ J_{z,k} \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

$J_{j,k}$ est le flux diffusif de l'espèce k et est présenté section 2.1.3 (Eq. 2.24). Le tenseur des contraintes τ_{ij} est explicité dans le paragraphe 2.1.4 (Eq. 2.25). Enfin, la partie 2.1.5 décrit le flux de chaleur q_j (Eq. 2.28).

L'état de référence standard qu'on utilise est $P_0 = 1$ bar et $T_0 = 0$ K. Les enthalpies sensibles massiques ($h_{s,k}$) et entropies massiques (s_k) sont tabulées pour 51 valeurs de température (T_i avec $i = 1, \dots, 51$) allant de 0 K à 5000 K avec un pas de 100 K. Ainsi, ces variables peuvent être évaluées de la manière

suivante :

$$h_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{p,k} dT = \frac{h_{s,k}^m(T_i) - h_{s,k}^m(T_0)}{W_k}, \quad \text{et} \quad (2.7)$$

$$s_k(T_i) = \frac{s_k^m(T_i) - s_k^m(T_0)}{W_k}, \quad \text{avec } i = 1, 51 \quad (2.8)$$

Les exposants m correspondent aux valeurs molaires. Les valeurs tabulées pour $h_{s,k}(T_i)$ et $s_k(T_i)$ peuvent être trouvées dans les tables JANAF [?]. L'énergie sensible de chaque espèce peut être reconstruite en suivant l'expression :

$$e_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0K}^{T_i} C_{v,k} dT = h_{s,k}(T_i) - r_k T_i \quad i = 1, 51 \quad (2.9)$$

On note que les capacités calorifiques massiques à pression constante : $c_{p,k}$ et à volume constant : $c_{v,k}$ sont supposées constantes entre T_i et $T_{i+1} = T_i + 100$. Elles sont définies comme étant la pente de l'enthalpie sensible ($C_{p,k} = \frac{\partial h_{s,k}}{\partial T}$) et de l'énergie sensible ($C_{v,k} = \frac{\partial e_{s,k}}{\partial T}$).

L'énergie sensible varie ainsi continûment avec la température et est obtenue par interpolation linéaire.

$$e_{s,k}(T) = e_{s,k}(T_i) + (T - T_i) \frac{e_{s,k}(T_{i+1}) - e_{s,k}(T_i)}{T_{i+1} - T_i} \quad (2.10)$$

L'énergie et l'enthalpie sensibles du mélange sont données par :

$$\rho e_s = \sum_{k=1}^N \rho_k e_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k e_{s,k} \quad (2.11)$$

$$\rho h_s = \sum_{k=1}^N \rho_k h_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k h_{s,k} \quad (2.12)$$

2.1.2 Equation d'état

L'équation d'état pour un mélange gazeux idéal est écrite :

$$p = \rho r T \quad (2.13)$$

où r est la constante des gaz du mélange, fonction de l'espace et du temps, et égale à : $r = \frac{R}{W}$, où W est la masse molaire moyenne du mélange :

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (2.14)$$

La constante des gaz r et les capacités calorifiques du mélange dépendent de la composition locale de celui-ci :

$$r = \frac{R}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} R = \sum_{k=1}^N Y_k r_k \quad (2.15)$$

$$C_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k} \quad (2.16)$$

$$C_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k} \quad (2.17)$$

où $R = 8.3143 \text{ J/mol.K}$ est la constante universelle des gaz. Le coefficient polytropique du mélange est donné par : $\gamma = C_p/C_v$. La constante des gaz, les capacités calorifiques et le coefficient polytropique ne sont pas constants : ils dépendent de la composition, donc des fractions massiques locales : $Y_k(x, t)$:

$$r = r(\vec{x}, t), \quad C_p = C_p(\vec{x}, t), \quad C_v = C_v(x, t), \quad \text{et} \quad \gamma = \gamma(\vec{x}, t) \quad (2.18)$$

On calcule la température à partir de l'énergie sensible en utilisant les équations (2.10) et (2.11). Comme on le verra plus tard, les conditions limites utilisent la vitesse du son du mélange, définie par :

$$c^2 = \gamma r T \quad (2.19)$$

2.1.3 Conservation de la masse : flux diffusif des espèces

Dans un écoulement d'un fluide multi-espèces, la conservation de la masse implique :

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_i^k = 0 \quad (2.20)$$

où V_i^k sont les composantes dans les directions ($i=1,2,3$) des vitesses de diffusion des espèces k . Elles sont souvent exprimées, à l'aide de l'approximation de Hirschfelder Curtis, comme des fonctions des gradients des espèces :

$$X_k V_i^k = -D_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad (2.21)$$

où X_k est la fraction molaire de l'espèce k : $X_k = Y_k W/W_k$. En termes de fractions massiques, l'approximation (2.21) peut être écrite :

$$Y_k V_i^k = -D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad (2.22)$$

En sommant l'équation (2.22) sur tous les k , on remarque que l'approximation (2.22) n'est pas nécessairement compatible avec l'équation (2.20) qui exprime la conservation de la masse. Pour la

conservation globale, une correction de la vitesse de diffusion est ajoutée à la vitesse de convection (voir [?]) :

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad (2.23)$$

Finalement , le flux diffusif de chaque espèce k prend la forme :

$$J_{i,k} = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right), \quad (2.24)$$

Ici, les D_k sont coefficients de diffusion de chaque espèce k dans le mélange (voir section 2.1.6).

2.1.4 Tenseur des contraintes visqueuses

Le tenseur des contraintes τ_{ij} est donné par les relations :

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{ll} \right), \quad (2.25)$$

et

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right), \quad (2.26)$$

L'équation (2.25) peut être aussi écrite :

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= \frac{2\mu}{3} \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial w}{\partial z} \right), & \tau_{xy} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \tau_{yy} &= \frac{2\mu}{3} \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial w}{\partial z} \right), & \tau_{xz} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \tau_{zz} &= \frac{2\mu}{3} \left(2 \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right), & \tau_{yz} &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (2.27)$$

où μ est la viscosité dynamique (voir section 2.1.6)

2.1.5 Vecteur flux de chaleur

Pour un mélange multi-espèces, un flux de chaleur additionnel doit être considéré ¹. Celui-ci est dû au transport de chaleur par diffusion des espèces. Le flux total s'écrit donc :

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{Conduction}} - \underbrace{\rho \sum_{k=1}^N \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) h_{s,k}}_{\text{Diffusion des espèces}} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N J_{i,k} h_{s,k}, \quad (2.28)$$

où λ est la conductivité thermique du mélange. Le second terme est donc un ajout au flux classique de chaleur.

¹Ici on ne considère ni les effets Soret, ni les effets Dufour

2.1.6 Coefficient de transport

Dans les codes de CFD pour les écoulements multi-espèces, la viscosité dynamique μ est souvent supposée indépendante de la composition du mélange et proche de celle de l'air², afin d'utiliser la loi de Sutherland. On fait la même hypothèse dans le code AVBP. On obtient :

$$\mu = c_1 \frac{T^{3/2}}{T + c_2} \frac{T_{ref} + c_2}{T_{ref}^{3/2}} \quad (2.29)$$

où c_1 et c_2 sont déterminées afin de correspondre à la viscosité réelle du mélange. Pour de l'air à $T_{ref} = 273$ K, on fixe $c_1 = 1.71 \cdot 10^{-5}$ kg/m.s et $c_2 = 110.4$ K (voir [?]). Une seconde loi, appelée loi en puissance, est aussi disponible :

$$\mu = c_1 \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \quad (2.30)$$

avec b compris entre 0.5 et 1.0. Par exemple, $b = 0.76$ pour l'air. La conductivité thermique du mélange peut être calculée à l'aide du nombre de Prandtl Pr du mélange :

$$\lambda = \frac{\mu C_p}{Pr} \quad (2.31)$$

avec Pr supposé constant en temps et en espace et fixé par l'utilisateur.

Le calcul des coefficients de diffusion des espèces D_k est un problème bien spécifique. Ces coefficients devraient être exprimés comme une fonction de coefficients binaires D_{ij} obtenus via la théorie cinétique des gaz (Hirschfelder et al. [?]). Dans AVBP, les coefficients de diffusion D_k de l'espèce k dans le mélange sont calculés suivant Bird et al. [?] :

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^N X_j / D_{jk}} \quad (2.32)$$

Les coefficients D_{ij} sont des fonctions complexes de collision entre molécules et des variables thermodynamiques. Pour un code de DNS utilisant une chimie complexe, utiliser (2.32) a un sens. Toutefois, dans la majorité des cas, les DNS emploient des schémas cinétiques simplifiés et une modélisation fine de ces coefficients a moins d'intérêt. Ainsi, une simplification est adoptée dans AVBP pour le calcul des D_k . Les nombres de Schmidt Sc_k des espèces sont supposés constants en espace et en temps (comme le nombre de Prandtl) afin de calculer les coefficients pour chaque espèce de la manière suivante :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \quad (2.33)$$

Les valeurs utilisées des nombres de Schmidt et de Prandtl sont celles fournies pour les gaz brûlés par des codes de calcul comme PREMIX ou COSILAB.

²Ce qui introduit des erreurs moins grandes que celles liées aux propriétés thermodynamiques.

2.1.7 Cinétique chimique

Les termes sources des équations (2.2) et (2.3) sont écrits respectivement :

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega}_T \\ \dot{\omega}_k \end{pmatrix}$$

où $\dot{\omega}_T$ est le taux de dégagement de chaleur et $\dot{\omega}_k$ le taux de réaction des espèces k . Le modèle de combustion employé dans AVBP est la loi d'Arrhenius écrite pour N réactifs et M réactions :

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} \mathcal{M}_{kj} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} \mathcal{M}_{kj}, \quad j = 1, M \quad (2.34)$$

Les taux de réaction des espèces k sont la somme des taux $\dot{\omega}_{kj}$ produits par les M réactions :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \quad (2.35)$$

où $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$ et \mathcal{Q}_j est le taux d'avancement de la réaction j et s'écrit³ :

$$\mathcal{Q}_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (2.36)$$

$K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont les taux de réaction direct et inverse de la réaction j :

$$K_{f,j} = A_{f,j} \exp\left(-\frac{E_{a,j}}{RT}\right) \quad (2.37)$$

où $A_{f,j}$ et $E_{a,j}$ sont respectivement la constante pré-exponentielle et l'énergie d'activation. $K_{r,j}$ se déduit de l'hypothèse d'équilibre :

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq}} \quad (2.38)$$

où K_{eq} est la constante d'équilibre définie par Kuo [?] :

$$K_{eq} = \left(\frac{P_0}{RT} \right)^{\sum_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{R} - \frac{\Delta H_j^0}{RT} \right) \quad (2.39)$$

avec $P_0 = 1$ bar. ΔH_j^0 and ΔS_j^0 sont l'enthalpie (sensible + chimique) et l'entropie globale de la réaction j :

$$\Delta H_j^0 = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k (h_{s,k}(T) + \Delta h_{f,k}^0) \quad (2.40)$$

³Cette formule est valable pour des réactions élémentaires. En revanche quand on considère des réactions globales, les coefficients ν'_{kj} et ν''_{kj} sont remplacés par des valeurs ajustées.

$$\Delta S_j^0 = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k s_k(T) \quad (2.41)$$

où $\Delta h_{f,k}^0$ est l'enthalpie massique de formation des espèces k à la température de référence $T_0 = 0$ K.

Le taux de dégagement de chaleur est finalement défini par :

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (2.42)$$

Epaississement du front de flamme : le modèle TF pour la DNS

Dans certaines DNS, il peut s'avérer utile d'être capable de simuler la propagation d'un front de flamme sans pour autant avoir à résoudre exactement sa structure. On peut citer deux méthodes pour réaliser ce type de calcul :

- La flamme peut être traitée comme une interface ayant une épaisseur nulle comme ce qui est fait avec le modèle de l'équation de G. Celui-ci implique le transport d'une fonction distance notée G [?] permettant de localiser la flamme.
- Le front de flamme est épaissi afin d'être résolu sur le maillage.

Dans AVBP, le modèle TF (pour *Thickened flame* [?, ?, ?, ?, ?]) est appliqué pour résoudre la zone réactionnelle en utilisant la loi d'Arrhénius.

L'équation de transport pour la fraction massique de l'espèce k , en utilisant les équations (2.23) et (2.24) est donnée par :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho (u_i + V_i^c) Y_k \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (2.43)$$

où $\dot{\omega}_k$ est le taux de réaction pour l'espèce k . Pour une flamme laminaire, les termes diffusifs $\vec{\nabla} J_k$ et les termes de réaction des espèces $\dot{\omega}_k$ s'équilibrent.

Les analyses dimensionnelles classiques [?] montrent que la vitesse de flamme laminaire S_L^0 et l'épaisseur de flamme laminaire δ_L^0 sont contrôlées par les termes de diffusion et les termes sources :

$$S_L^0 \propto \sqrt{D_{th} A} \quad (2.44)$$

$$\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L^0} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \quad (2.45)$$

où A est la constante pré-exponentielle de la réaction. Pour une flamme laminaire, les diffusivités thermiques et moléculaires D_{th} and D_k sont remplacées par $\mathcal{F} D_{th}$ and $\mathcal{F} D_k$ et les termes sources des réactions $\dot{\omega}_k$ par $\frac{\dot{\omega}_k}{\mathcal{F}}$, où \mathcal{F} est le facteur d'épaississement. L'équation (2.43) devient alors :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho (u_i + V_i^c) Y_k \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \mathcal{F} D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \frac{\dot{\omega}_k}{\mathcal{F}} \quad (2.46)$$

avec

$$V_i^c = \sum_{k=1}^n \mathcal{F} D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.47)$$

Les équations (2.44) et (2.45) montrent que la vitesse de flamme laminaire reste la même que lorsqu'il n'y a pas d'épaississement, tandis que son épaisseur est multipliée par le facteur \mathcal{F} . Le facteur d'épaississement est déterminé en fonction du maillage utilisé pour le calcul et fourni comme paramètre par l'utilisateur. Sa valeur, dans le cas d'écoulements turbulents, sera discutée dans la section suivante.

2.2 Equations de la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique - phase porteuse

2.2.1 Le principe de la LES

La simulation aux grandes échelles (SGE) ou en anglais *Large Eddy Simulation* (LES) [?, ?] est désormais reconnue comme une alternative aux méthodologies RANS classiques (pour *Reynolds Averaged Navier-Stokes*). Bien que reposant sur des approches différentes, les deux méthodes ont le même but : écrire un nouveau système d'équations permettant de décrire les caractéristiques des écoulements turbulents.

Le développement de ce nouveau système d'équations est obtenu en introduisant des opérateurs qu'on applique aux équations de Navier-Stokes. Cette étape fait apparaître des termes qu'il faut fermer en utilisant des modèles, afin de pouvoir résoudre le problème. La différence principale entre RANS et LES vient de l'opérateur employé. Dans les méthodes RANS, l'opération consiste à utiliser une moyenne sur l'ensemble des réalisations de l'écoulement étudié [?, ?], qu'on remplace souvent, sous l'hypothèse d'ergodicité, par une moyenne temporelle. Les termes non fermés sont représentatifs des phénomènes physiques qui ont lieu sur tout le spectre de l'ensemble des réalisations considérées. Dans le cas de la LES, l'opérateur est un filtre de taille Δ , localisé dans l'espace et indépendant par rapport au temps, qui sépare les grandes (dont la taille est supérieure à celle de filtre) et les petites échelles. Les termes non fermés sont alors représentatifs des phénomènes physiques associés aux petites structures (de hautes fréquences) présentes dans l'écoulement. La figure 2.1 illustre les différences entre RANS (a) et LES (b) lorsque ces méthodes sont appliquées à un champ turbulent homogène et isotrope (THI).

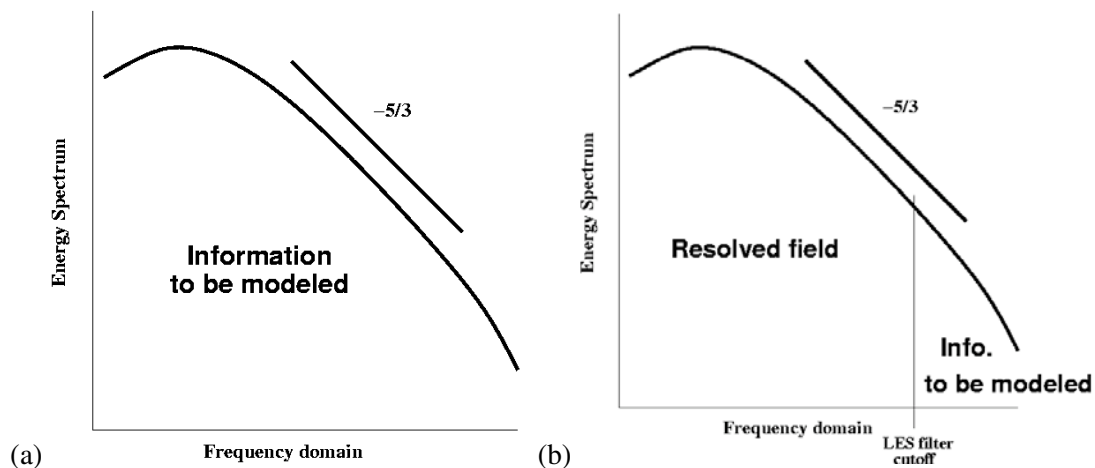


FIG. 2.1 - Représentation conceptuelle de l'application des méthodes RANS (a) et LES (b) à une THI (on montre le spectre de l'énergie cinétique turbulente).

Grâce au filtrage, la LES permet une représentation dynamique du mouvement des grandes échelles dont la contribution est cruciale dans les géométries complexes. Les prédictions des écoulements turbulents via la LES sont, de ce fait, plus proches de la physique car les phénomènes de grande échelle comme les gros tourbillons et les ondes acoustiques font partie intégrante des solutions obtenues en résolvant les équations de Navier-Stokes filtrées [?].

Pour toutes ces raisons, la LES a un très grand potentiel pour réaliser la description des écoulements turbulents qu'on rencontre dans les applications industrielles. Ces possibilités sont néanmoins réduites

par les hypothèses introduites lors de la mise au point des modèles LES. Dans la suite, on décrit les équations résolues dans AVBP pour les LES des écoulements réactifs.

2.2.2 Equations filtrées pour les écoulements non réactifs

Les grandeurs filtrées \bar{f} sont définies comme le produit de convolution entre la grandeur instantanée f et un filtre G_Δ de taille caractéristique Δ :

$$\bar{f}(\vec{x}, t) = \int f(\vec{y}, t) G_\Delta(\vec{x} - \vec{y}) d\vec{y} \quad (2.48)$$

\bar{f} est la grandeur résolue dans les simulations numériques tandis que les quantités de sous-maille $f' = f - \bar{f}$ ne le sont pas. On notera que dans AVBP, aucun filtre n'est appliqué explicitement. Celui-ci est implicite et est la conséquence de la résolution des équations sur un domaine discrétisé. Pour les écoulements à densité ρ variable, on introduit le filtrage pondéré par la masse volumique (notation : \tilde{f}) par analogie avec la moyenne de Favre :

$$\bar{\rho} \tilde{f} = \overline{\rho f} \quad (2.49)$$

Les équations de conservation pour la LES sont obtenues en appliquant le filtre sur les équations de conservations décrites section 2.1.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{P} \delta_{ij} - \bar{\tau}_{ij} - \bar{\tau}_{ij}^t], \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{E} \tilde{u}_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{u_i (P \delta_{ij} - \tau_{ij})} + \bar{q}_j + \bar{q}_j^t] + \bar{\omega}_T + \bar{Q}_r, \quad (2.51)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{u}_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{J}_{j,k} + \bar{J}_{j,k}^t] + \bar{\omega}_k, \quad (2.52)$$

et la règle d'Einstein est appliquée pour les indices répétés. On rappelle que dans cette section, comme dans la précédente, l'indice k est réservé à la k -ième espèce et ne suit pas la règle susmentionnée.

Dans les équations (2.50), (2.51) et (2.52), le tenseur des flux peut être divisé en trois parties : non visqueuse (ou convective), visqueuse et turbulente de sous-maille. On donne leur expression :

Termes non visqueux :

Les composantes du flux non visqueux sont les mêmes que celles utilisées en DNS mais basées sur les quantités filtrées. Le vecteur des variables conservatives filtrées s'écrit : $\bar{\mathbf{U}} = (\bar{\rho} \tilde{u}, \bar{\rho} \tilde{v}, \bar{\rho} \tilde{w}, \bar{\rho} \tilde{E}, \bar{\rho} \tilde{Y}_k)$:

$$\bar{\mathbf{F}}^C = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \tilde{u}^2 + \bar{p} \\ \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{v} \\ \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{w} \\ \bar{\rho} \tilde{E} \tilde{u} + \bar{p} \tilde{u} \\ \bar{\rho}_k \tilde{u} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{G}}^C = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{v} \\ \bar{\rho} \tilde{v}^2 + \bar{p} \\ \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{w} \\ \bar{\rho} \tilde{E} \tilde{v} + \bar{p} \tilde{v} \\ \bar{\rho}_k \tilde{v} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{H}}^C = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \tilde{u} \tilde{w} \\ \bar{\rho} \tilde{v} \tilde{w} \\ \bar{\rho} \tilde{w}^2 + \bar{p} \\ \bar{\rho} \tilde{E} \tilde{w} + \bar{p} \tilde{w} \\ \bar{\rho}_k \tilde{w} \end{pmatrix}, \quad (2.53)$$

Termes visqueux :

Les termes visqueux s'écrivent :

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{F}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}} \\ -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{xz}} \\ -(\overline{u \tau_{xx}} + \overline{v \tau_{xy}} + \overline{w \tau_{xz}}) + \overline{q_x} \\ \overline{J_{x,k}} \end{pmatrix} \\ \bar{\mathbf{G}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}} \\ -\overline{\tau_{yy}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -(\overline{u \tau_{xy}} + \overline{v \tau_{yy}} + \overline{w \tau_{yz}}) + \overline{q_y} \\ \overline{J_{y,k}} \end{pmatrix} \\ \bar{\mathbf{H}}^V &= \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}} \\ -\overline{\tau_{yz}} \\ -\overline{\tau_{zz}} \\ -(\overline{u \tau_{xz}} + \overline{v \tau_{yz}} + \overline{w \tau_{zz}}) + \overline{q_z} \\ \overline{J_{z,k}} \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{2.54}$$

(2.55)

Le filtrage des équations de conservation fait en outre apparaître des termes non fermés qu'il est nécessaire de modéliser : **Termes de turbulence de sous-maille :**

Ses composantes s'expriment de la manière suivante :

$$\bar{\mathbf{F}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xx}}^t \\ -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{xz}}^t \\ \overline{q_x}^t \\ \overline{J_{x,k}}^t \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{G}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xy}}^t \\ -\overline{\tau_{yy}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ \overline{q_y}^t \\ \overline{J_{y,k}}^t \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{H}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{xz}}^t \\ -\overline{\tau_{yz}}^t \\ -\overline{\tau_{zz}}^t \\ \overline{q_z}^t \\ \overline{J_{z,k}}^t \end{pmatrix},\tag{2.56}$$

Les termes visqueux filtrés pour les écoulements non réactifs

Les termes de diffusion filtrés sont les suivants (voir T. Poinso et D. Veynante, Chapitre 4 [?]) :

– Le tenseur des contraintes visqueuses laminares $\widetilde{\tau}_{ij}$ est donné par les relations qui suivent :

$$\begin{aligned}\overline{\tau_{ij}} &= \overline{2\mu(S_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}S_{ll})}, \\ &\approx 2\overline{\mu}(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{ll}),\end{aligned}\tag{2.57}$$

et

$$\widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j}),\tag{2.58}$$

L'équation (2.57) peut être réécrite :

$$\begin{aligned}\overline{\tau_{xx}} &\approx \frac{2\bar{\mu}}{3} \left(2\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} - \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right), & \overline{\tau_{xy}} &\approx \bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right) \\ \overline{\tau_{yy}} &\approx \frac{2\bar{\mu}}{3} \left(2\frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} - \frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} \right), & \overline{\tau_{xz}} &\approx \bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial z} + \frac{\partial \tilde{w}}{\partial x} \right) \\ \overline{\tau_{zz}} &\approx \frac{2\bar{\mu}}{3} \left(2\frac{\partial \tilde{w}}{\partial z} - \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} - \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} \right), & \overline{\tau_{yz}} &\approx \bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial z} + \frac{\partial \tilde{w}}{\partial y} \right)\end{aligned}\quad (2.59)$$

qui correspondent aux termes qu'on a fait apparaître pour exprimer le tenseur de flux visqueux (Eq.(2.54)).

- Le terme de diffusion des espèces est donné par (dans le cas d'un écoulement non-réactif) :

$$\begin{aligned}\overline{J_{i,k}} &= -\rho \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) \\ &\approx -\bar{\rho} \left(\bar{D}_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^c \right),\end{aligned}\quad (2.60)$$

et on suppose que les corrélations d'ordre élevé entre les différentes variables sont négligeables.

- Le flux de chaleur filtré s'écrit :

$$\begin{aligned}\overline{q_i} &= -\bar{\lambda} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k} h_{s,k}} \\ &\approx -\bar{\lambda} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}} \tilde{h}_{s,k}\end{aligned}\quad (2.61)$$

Ces équations supposent que les variations spatiales des flux diffusifs d'espèces sont négligeables et peuvent être modélisées comme de simples gradients.

Termes de turbulence de sous-maille pour la LES des écoulements non réactifs

Comme on l'a mentionné précédemment, l'opération de filtrage fait apparaître des termes à fermer (voir Eq.(2.56)) qu'on nomme termes de "sous-maille" (en anglais SGS : *sub-grid scales*) et qu'il faut modéliser afin de pouvoir résoudre le problème.

- Le tenseur de Reynolds est défini par :

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j), \quad (2.62)$$

et modélisé de la façon suivante :

$$\overline{\tau_{ij}}^t = 2 \bar{\rho} \nu_t (\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{ll}), \quad (2.63)$$

Le calcul de ν_t est expliqué par la suite.

- Le vecteur flux diffusif de sous-maille des espèces s'écrit :

$$\overline{J_{i,k}}^t = \bar{\rho} (\widetilde{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k), \quad (2.64)$$

$\overline{J_{i,k}}^t$ est modélisé comme suit :

$$\overline{J_{i,k}}^t = -\bar{\rho} \left(D_k^t \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^{c,t} \right), \quad (2.65)$$

avec

$$D_k^t = \frac{\nu_t}{Sc_k^t} \quad (2.66)$$

Le nombre de Schmidt turbulent $Sc_k^t = 1$ est le même pour toutes les espèces et est fixé dans le code (comme Pr^t). Il faut noter de plus qu'avoir un seul nombre de Schmidt turbulent pour toutes les espèces n'implique pas forcément $\tilde{V}^{c,t} = 0$ à cause du terme W_k/W dans (2.65).

– Le flux de chaleur de sous-maille est donné par :

$$\overline{q_i}^t = \overline{\rho}(\widetilde{u_i E} - \widetilde{u_i} \widetilde{E}), \quad (2.67)$$

où e est l'énergie sensible. Sa modélisation est la suivante :

$$\overline{q_i}^t = -\lambda_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}}^t \widetilde{h_{s,k}}, \quad (2.68)$$

avec

$$\lambda_t = \frac{\mu_t \overline{C_p}}{Pr^t}. \quad (2.69)$$

Le choix du Prandtl turbulent dépend du type d'écoulement étudié. Moin [?] indique que les valeurs pour une THI sont aux alentours de 0.5 (pour l'air). Avec les méthodes RANS, le choix est souvent $Pr^t = 0.9$.

Dans AVBP, les vitesses de diffusion de correction sont obtenues comme suit :

$$\widetilde{V}_i^c + \widetilde{V}_i^{c,t} = \sum_{k=1}^N \left(\frac{\overline{\mu}}{\overline{\rho} Sc_k} + \frac{\mu_t}{\overline{\rho} Sc_k^t} \right) \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i}, \quad (2.70)$$

et les équations(2.33) et (2.66) sont employées.

2.2.3 Modèles pour le tenseur des contraintes de sous-maille $\overline{\tau_{ij}}^t$:

Les modèles utilisés en LES proviennent de théories dans lesquelles on suppose que le filtre de sous-maille est invariant en temps ET en espace. Ainsi, les effets de maillages non-uniformes ou mobiles ne sont pas pris en compte dans ces modèles. Des discussions concernant les erreurs de commutation entre les opérateurs de dérivées et le filtrage peuvent être trouvées dans [?, ?, ?]. La seule prise en compte du changement de topologie des cellules est indirecte, via la définition de la taille du filtre Δ faisant intervenir le volume des cellules.

En principe, les modèles LES interdisent l'utilisation de viscosité artificielle ou même d'un schéma numérique de convection introduisant de la diffusion numérique (exception faite des modèles MILES qui utilisent la diffusion numérique du schéma [?, ?]). En pratique, on peut faire fi de cette interdiction, à condition que les diffusions artificielles ou numériques soient faibles devant celle introduite par le modèle LES.

Les équations de Navier-Stokes filtrées font apparaître des tenseurs et vecteurs de sous-maille décrivant l'interaction entre les échelles résolues et non-résolues. Leur influence sur le mouvement résolu est prise en compte par l'introduction d'une viscosité turbulente ν_t à travers les contributions de sous-maille. Une telle approche suppose que l'effet des échelles de sous-maille sur les structures résolues est purement dissipatif. Cette hypothèse prévaut principalement dans le cadre de la théorie de la cascade d'énergie turbulente introduite par Kolmogorov [?]. Le modèle de sous-maille classique fait intervenir la notion de viscosité turbulente et s'écrit :

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\overline{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}) \quad (2.71)$$

$$= 2 \overline{\rho} \nu_t \widetilde{S_{ij}} - \frac{1}{3} \overline{\rho} \nu_t^t \delta_{ij}, \quad (2.72)$$

avec

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (2.73)$$

et $\overline{\tau_{ij}}^t$ est le tenseur de sous-maille, ν_t est la viscosité turbulente, \tilde{u}_i est la grandeur filtrée de Favre (pour les écoulements compressibles) et \tilde{S}_{ij} est le tenseur des taux de déformations résolus (partie symétrique du tenseur gradient des vitesses). La littérature est particulièrement riche en modèle de turbulence pour la LES et en particulier pour les fluides incompressibles [?, ?, ?, ?]. On présente les différents modèles présents dans AVBP pour exprimer la viscosité turbulente.

Modèle de Smagorinsky

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}}, \quad (2.74)$$

Δ est la taille caractéristique du filtre, prise égale à : $\Delta = (V_e)^{1/3}$ (V_e est le volume d'une cellule), C_S est la constante de Smagorinsky. Sa valeur peut varier entre 0.1 et 0.18, en fonction de l'écoulement étudié. Le modèle de Smagorinsky [?] a été développé dans les années 60 [?] et testé depuis dans de nombreuses configurations différentes. Ce modèle de fermeture fournit exactement le bon taux de dissipation d'énergie cinétique dans le cas d'une THI. Sa popularité vient de sa simplicité d'utilisation avant tout. Néanmoins, il est aussi réputé pour être généralement trop dissipatif [?, ?]. Le calcul de la viscosité turbulente étant basé sur le tenseur $\underline{\underline{S}}$, celle-ci devient trop importante en présence de forts gradients moyens (qu'on peut rencontrer dans les couches de mélange et près des parois). Ainsi, le modèle de Smagorinsky peut introduire de la viscosité turbulente dans une zone de fort cisaillement, même si l'écoulement est laminaire [?]. Il vaut donc mieux éviter d'utiliser ce modèle pour simuler la transition à la turbulence [?].

Modèle de Smagorinsky filtré

$$\nu_t = (C_{S_F} \Delta)^2 \sqrt{2 \mathcal{F}_{PH}(\tilde{S}_{ij}) \mathcal{F}_{PH}(\tilde{S}_{ij})}, \quad (2.75)$$

où Δ est la taille caractéristique du filtre (racine cubique du volume d'une cellule), $C_{S_F} = 0.37$ est la constante du modèle (à l'instar de C_S pour le modèle précédent) et $\mathcal{F}_{PH}(\tilde{S}_{ij})$ est le tenseur des taux de déformation résolu et filtré (\mathcal{F}_{PH} étant un filtre passe-haut). Ce modèle a été développé afin d'obtenir une représentation plus locale et donc plus fidèle des phénomènes turbulents, le filtre permettant, par exemple, d'éliminer une composante moyenne de cisaillement (et éviter de mettre une viscosité turbulente là où il n'en faut pas !). Avec ce modèle, la transition vers la turbulence est mieux prédite.

Modèle WALE (Wall Adapting Local Eddy-viscosity)

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2} (\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij}, \quad (2.76)$$

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}}, \quad (2.77)$$

où Δ est la taille caractéristique du filtre (racine cubique du volume d'une cellule), $C_w = 0.4929$ est la constante du modèle et \tilde{g}_{ij} est le gradient des vitesses résolues. Ce modèle a été introduit par Nicoud et Ducros [?]. Le but est d'obtenir un comportement réaliste de la viscosité turbulente en zone proche paroi et une transition correcte vers la turbulence, deux des principaux points faibles du modèle de Smagorinsky.

Autres modèles

On a présenté les trois principaux modèles utilisés dans AVBP. Colin et Albouze ont implanté le modèle dynamique de Smagorinsky décrit par Germano [?] et Lilly [?]. Celui-ci a été développé pour pallier aux défauts du modèle d'origine. L'objectif est une détermination plus exacte du niveau de viscosité turbulente à introduire. La constante (qui, pour le coup, n'est plus constante) de Smagorinsky est recalculée localement en faisant intervenir un deuxième niveau de filtrage. En effet, l'utilisation du deuxième filtre $G_{\Delta'}$ de taille caractéristique Δ' supérieure à celle du premier permet d'obtenir une zone du spectre d'énergie cinétique qui est résolue lors de l'utilisation du filtre G_{Δ} et modélisée avec $G_{\Delta'}$. Après quelques manipulations algébriques, on peut donc en déduire la valeur de C_S .

Moureau [?] a, quant à lui, implanté l'équation de k (énergie cinétique turbulente). En résolvant le transport de l'énergie cinétique turbulente, on peut en effet écrire une viscosité turbulente.

Il convient de noter que la majorité des modèles permettant le calcul de ν_t et présentés ici provient de théories basées sur la turbulence en écoulements incompressibles. Il existe des modèles, comme on va le rappeler par la suite, permettant de prendre en compte les effets de dilatation de sous-maille [?, ?, ?]. Ainsi pendant cette thèse, le modèle de Yoshizawa[?, ?] a été implanté par A.Roux et l'auteur de ce manuscrit. Les écoulements dans les configurations présentées dans cette thèse ne nécessitant pas l'utilisation de ce modèle (pour la phase porteuse), on ne rentrera pas plus dans les détails.

2.2.4 Le modèle de flamme épaissie

Un problème est rencontré en LES pour les flammes prémélangées : l'épaisseur δ_L^0 est généralement bien plus petite que la taille caractéristique d'une maille (qu'on notera h). Pour cette raison, le modèle flamme épaissie (TF - pour *thickened flame*) a été développé afin de permettre la résolution du front de flamme. Dans la section 2.1.7, l'épaississement de la flamme laminaire de δ_L^0 à $\mathcal{F} \delta_L^0$ a été présenté. Dans les écoulements turbulents, l'interaction entre la turbulence et la chimie est altérée : les échelles plus petites que $\mathcal{F} \delta_L^0$ n'interagissent plus avec la flamme. De ce fait, l'épaississement réduit le plissement de la flamme par les tourbillons. De plus, comme la surface de flamme est réduite (du fait du plissement diminué artificiellement), le taux de réaction est sous-estimé. Pour corriger cet effet, une fonction d'efficacité notée \mathcal{E} a été ajoutée par Colin [?] afin de contrecarrer l'effet de l'épaississement. Celle-ci a été développée à partir de résultats de DNS (voir figure 2.2).

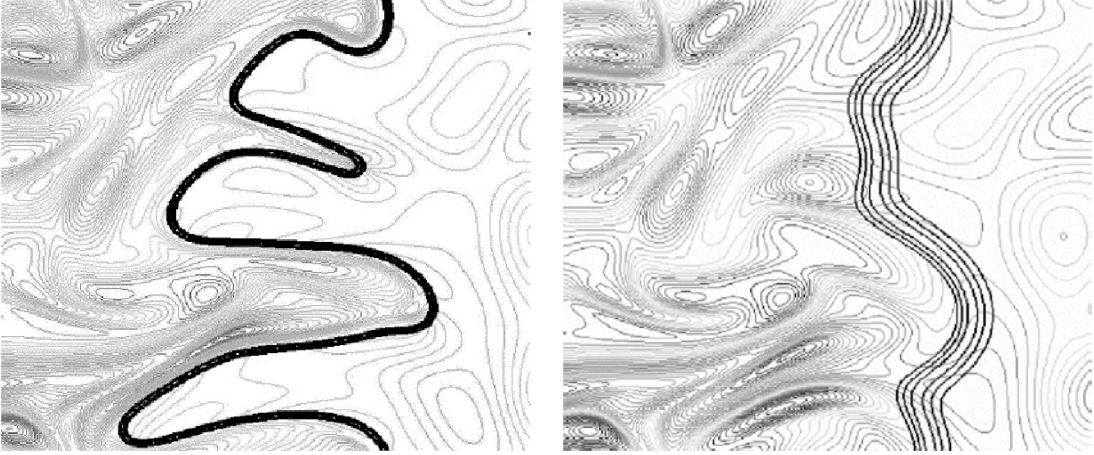


FIG. 2.2 - Simulation Numérique Directe (SND ou DNS) des interactions flamme / turbulence ([?], [?]). A gauche : front non épaissi. A droite : flamme épaissie avec $\mathcal{F} = 5$.

Modèle de combustion de sous-maille - fonction d'efficacité : \mathcal{E}

Une description complète de la fonction d'efficacité est fournie dans [?]. La philosophie du modèle peut être résumée en trois étapes :

- Le facteur de plissement de la surface de flamme Ξ est estimé à partir de la densité de surface de flamme $\bar{\Sigma}$, en supposant un équilibre entre turbulence et surface de flamme de sous-maille, ce qui donne :

$$\Xi \simeq 1 + \alpha \frac{\Delta_e}{S_L^0} \langle a_T \rangle_s \quad (2.78)$$

où $\langle a_T \rangle_s$ est le taux de déformation de sous-maille, Δ_e est la taille du filtre et α est une constante du modèle.

- $\langle a_T \rangle_s$ est estimé à partir de la taille Δ_e du filtre et d'une vitesse turbulente de sous-maille u'_{Δ_e} :

$$\langle a_T \rangle_s = \Gamma u'_{\Delta_e} / \Delta_e,$$

et la fonction Γ correspond à la contribution au taux de déformation de toutes les échelles affectées par l'épaississement, c'est-à-dire de l'échelle de Kolmogorov η_K jusqu'à l'échelle correspondant à la taille du filtre Δ_e (voir[?]). Γ est donc égale :

$$\Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \right) = 0.75 \exp \left[-\frac{1.2}{\left(u'_{\Delta_e} / S_L^0 \right)^{0.3}} \right] \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (2.79)$$

Au final, la fonction d'efficacité est définie comme le ratio entre le plissement de flamme de référence (non épaissie) et celui de la flamme épaissie :

$$\mathcal{E} = \frac{\Xi(\delta_L^0)}{\Xi(\delta_L^1)} = \frac{1 + \alpha \Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}}{1 + \alpha \Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}} \quad (2.80)$$

S_L^0 et δ_L^0 sont respectivement la vitesse et l'épaisseur de flamme laminaire lorsque $\mathcal{F} = 1$ et $\delta_L^1 = \mathcal{F} \delta_L^0$.

\mathcal{E} varie entre 1 (faible intensité turbulente) et $\mathcal{E}_{max} \simeq \mathcal{F}^{2/3}$ (plissement de sous-maille important). Dans les zones turbulentes prémélangées, la fonction d'efficacité est déterminée pour assurer que la vitesse de flamme turbulente est égale à $S_T = \mathcal{E} S_L^0$. Colin et al. [?] font en outre apparaître une échelle de coupure δ_L^c telle que tout tourbillon de taille inférieure à δ_L^c n'affecte pas le plissement de la flamme. Ainsi la fonction d'efficacité est utilisée si la taille caractéristique r d'un tourbillon qui atteint la flamme est telle que :

- $\delta_L^0 > r > \delta_L^c$ si la flamme n'est pas épaissie
- $\delta_L^1 = \beta \mathcal{F} \delta_L^0 > r > \delta_L^c$ si la flamme est épaissie et β est une constante du modèle.
- La taille Δ_e du filtre correspond à la plus grande échelle qui affecte la flamme épaissie. En pratique, on a souvent : $\Delta_e = 10\Delta$ où $\Delta = \sqrt[3]{V_e}$ est une taille caractéristique. La vitesse caractéristique de sous-maille u'_{Δ_e} est estimée à partir du rotationnel de la vitesse résolue (afin d'éliminer la partie dilation de la vitesse qu'on ne compte pas ici comme faisant partie de la turbulence). L'opérateur permettant de définir u'_{Δ_e} est le suivant :

$$u'_{\Delta_e} = c_2 \Delta^3 \left| \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_j} \left(\epsilon_{lmn} \frac{\partial \bar{u}_n}{\partial x_m} \right) \right| \quad (2.81)$$

avec $c_2 \approx 2$ et où ϵ_{lmn} correspond au tenseur des permutations.

Estimation de la constante α

La constante α est estimée pour obtenir le bon comportement asymptotique de Ξ en fonction des fluctuations de vitesse RMS u' , pour des flammes minces lorsque Δ_e tend vers l'échelle intégrale l_t . Normalement, Ξ doit tendre vers Ξ_{max} défini par (2.82) :

$$\Xi_{max} = 1 + \beta u' / S_L^0 \quad (2.82)$$

avec u' la vitesse turbulente correspondant à l'échelle intégrale. On en déduit α à partir de (2.82) :

$$\alpha = \beta \frac{2 \ln(2)}{3 c_{ms} [Re_t^{1/2} - 1]} \quad (2.83)$$

et le nombre de Reynolds turbulent est donné par : $Re_t = \frac{u' l_t}{\nu}$. c_{ms} est égale à 0.28. Il existe différentes manières de définir α et β . Plus d'informations peuvent être trouvées dans [?] ou [?].

Modèle de flamme épaissie standard (modèle TF)

On écrit ici les équations filtrées de l'énergie totale et de conservation des espèces (équations (2.51 et (2.52) qu'on a modifiées pour prendre en compte les écoulements réactifs lorsqu'on utilise les modèles TF et DTF (pour *dynamic thickened flame*). Dans ce cas, seules les équations filtrées pour la quantité de mouvement (Eq.(2.50)) ne sont pas modifiées. Pour les équations d'énergie et d'espèces, on *remplace* les équations filtrées par les équations avec épaississement. Les différents flux et termes sources intervenant sont les suivants :

Termes visqueux

- Le flux diffusif d'espèces est donné par :

$$\overline{J_{i,k}} = - \mathcal{E} \mathcal{F} \frac{\bar{\mu}}{S_{C_k}} \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} + \bar{\rho}_k \tilde{V}_i^c, \quad (2.84)$$

avec :

$$\tilde{V}_i^c = \mathcal{E} \mathcal{F} \sum_{k=1}^N \frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho} S c_k} \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i}, \quad (2.85)$$

– Le flux de chaleur est défini par :

$$\bar{q}_i = - \mathcal{E} \mathcal{F} \frac{\bar{\mu} C_p}{Pr} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}} \tilde{h}_{s,k}, \quad (2.86)$$

Termes sources :

Le vecteur terme source de l'équation (2.49) s'écrit :

$$\bar{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\mathcal{E} \dot{\omega}_T(\tilde{Y}_k, \tilde{T})}{\mathcal{F}} \\ \frac{\mathcal{E} \dot{\omega}_k(\tilde{Y}_k, \tilde{T})}{\mathcal{F}} \end{pmatrix}, \quad (2.87)$$

où $\dot{\omega}_T(\tilde{Y}_k, \tilde{T})$ et $\dot{\omega}_k(\tilde{Y}_k, \tilde{T})$ sont les taux de réaction calculés à l'aide de la loi d'Arrhénius et des quantités filtrées \tilde{Y}_k et \tilde{T} . Il faut noter que ce modèle ne devrait être utilisé que pour des cas parfaitement prémélangés car le mélange des gaz frais est modifié par l'épaississement et n'est pas prédit correctement par les grandeurs filtrées.

Epaississement dynamique pour la LES (modèle DTFLES)

Le modèle TF est adéquat pour la simulation des flammes parfaitement prémélangées. En revanche, pour les cas partiellement prémélangés, il ne s'avère guère adapté et doit être revu pour plusieurs raisons :

- Dans les zones non réactives où seul le mélange a lieu, les diffusions thermiques et moléculaires sont surestimées par le facteur \mathcal{F} . Dans ces zones, l'épaississement devrait être égal à 1. En outre, les contributions de sous-maille des flux de chaleur et d'espèce devraient être prises en compte (car elles sont supprimées dans les équations de l'énergie et des espèces dès que l'épaississement est plus grand que 1).
- Dans la flamme, l'épaississement permet de résoudre la diffusion et les termes sources. Ainsi, les termes de sous-maille peuvent être annulés.

En d'autres mots, le modèle TF doit rester inchangé dans la flamme mais doit être adapté à l'extérieur de la flamme. Ainsi le modèle DTF (épaississement dynamique) a été développé pour tenir compte de ces remarques [?]. Son application est décrite sur la figure 2.2.4. Le facteur d'épaississement n'est plus une constante et varie de 1 à \mathcal{F}_{max} (des zones non réactives aux zones réactives), comme l'indique l'équation qui suit :

$$\mathcal{F} = 1 + (\mathcal{F}_{max} - 1) \mathcal{S} \quad (2.88)$$

où \mathcal{S} est un senseur dépendant de la température locale et des fractions massiques et qui s'écrit :

$$\mathcal{S} = \tanh(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}) \quad (2.89)$$

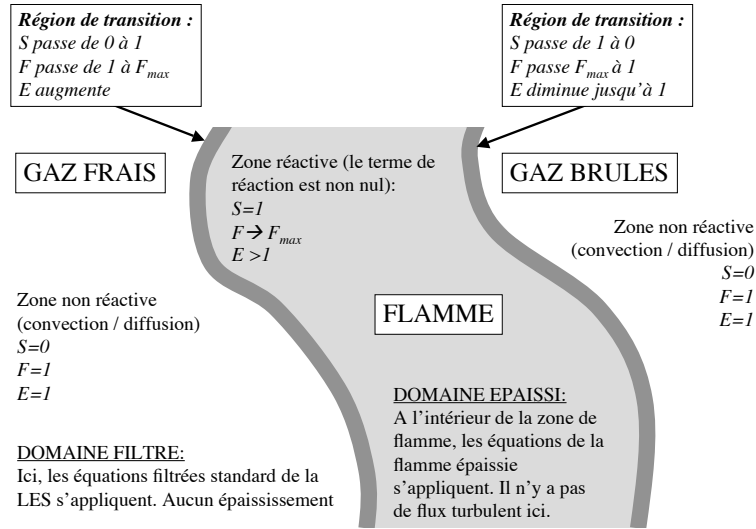


FIG. 2.3 - Représentation schématique des différentes régions qu'on rencontre dans une flamme partiellement prémélangée et comportement du modèle DTF.

où Ω est une fonction détectant la présence du front de réaction. Une méthode pour construire Ω est basée sur l'utilisation des paramètres du schéma cinétique utilisé :

$$\Omega = Y_F^{\nu'_F} Y_O^{\nu'_O} \exp(-\Gamma_T \frac{E_a}{RT}) \quad (2.90)$$

La constante Γ_T est utilisée afin de déclencher l'épaississement avant la zone réactive et a une valeur typiquement aux alentours de 0.5. Le facteur β' est pris égal à 500 dans AVBP. Enfin on note que S varie de 0 (zones non réactives) à 1 (flamme).

Au final, on obtient les équations suivantes :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) &= - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{P} \delta_{ij} - 2 (\bar{\mu} + \mu_t) (\tilde{S}_{ij} - 1/3 \tilde{S}_{ll} \delta_{ij}) \right], \\
 \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{E} \tilde{u}_j) &= - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tilde{u}_i \bar{P} \delta_{ij} - 2 \bar{\mu} \tilde{u}_i (\tilde{S}_{ij} - 1/3 \tilde{S}_{ll} \delta_{ij}) \right] \\
 &\quad + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[C_p \left(\mathcal{E} \mathcal{F} \frac{\bar{\mu}}{Pr} + (1 - \mathcal{S}) \frac{\mu_t}{Pr^t} \right) \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \right] \\
 &\quad + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\sum_{k=1}^N \left(\left[\mathcal{E} \mathcal{F} \frac{\bar{\mu}}{Sc_k} + (1 - \mathcal{S}) \frac{\mu_t}{Sc_k^t} \right] \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_j} - \bar{\rho} \tilde{Y}_k (\tilde{V}_j^c + \tilde{V}_j^{c,t}) \right) \tilde{h}_{s,k} \right] \\
 &\quad + \frac{\mathcal{E} \dot{\omega}_T}{\mathcal{F}}, \\
 \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{u}_j) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mathcal{E} \mathcal{F} \frac{\bar{\mu}}{Sc_k} + (1 - \mathcal{S}) \frac{\mu_t}{Sc_k^t} \right) \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_j} - \bar{\rho} \tilde{Y}_k (\tilde{V}_j^c + \tilde{V}_j^{c,t}) \right] \\
 &\quad + \frac{\mathcal{E} \dot{\omega}_k}{\mathcal{F}},
 \end{aligned} \tag{2.91}$$

qu'on peut aussi écrire sous forme compacte :

$$\boxed{\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \bar{\vec{\mathcal{F}}} = \bar{\mathbf{S}}} \tag{2.92}$$

2.3 Equations de la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique - phase dispersée

2.3.1 Filtrage des équations de la phase dispersée

La procédure est la même que pour la phase gazeuse. De la même manière, on introduit un filtrage de Favre en pondérant non plus par la masse volumique mais avec $\check{\alpha}_p$:

$$\bar{\alpha}_p \hat{f}_p = \overline{\check{\alpha}_p \check{f}_p} \quad (2.93)$$

où $\bar{\alpha}_p$ est la fraction volumique filtrée. Le filtrage de Favre utilisé par Riber [?] pour les écoulements monodisperses était basé sur une pondération avec \check{n}_p . Comme le souligne Boileau [?], on a équivalence entre les deux filtres si on fait l'hypothèse que l'écoulement est monodisperse à l'échelle du filtre, ce qui revient à négliger les effets de sous-maille de variance du diamètre. On a alors :

$$\overline{\check{n}_p \check{f}_p} = \overline{\frac{6\check{\alpha}_p}{\pi \check{d}^3} \check{f}_p} = \frac{6}{\pi \check{d}^3} \bar{\alpha}_p \hat{f}_p = \bar{n}_p \hat{f}_p \quad (2.94)$$

où \bar{n}_p est la densité de goutte filtrée et \check{d} est le diamètre mésoscopique pour lequel on a supposé que : $\check{d} = \check{d}'$, soit $\check{d}' = 0$.

On applique le filtre G_Δ aux équations de conservation décrite dans la section 1.2, ce qui donne :

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{n}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_p \hat{u}_{p,j} = 0 \quad (2.95)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_p \bar{\alpha}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_{p,j} = -\bar{\Gamma} \quad (2.96)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_{p,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_{p,i} \hat{u}_{p,j} &= \frac{\rho_p \bar{\alpha}_p}{\bar{\tau}_p} (\hat{u}_i - \hat{u}_{p,i}) - \bar{\Gamma} \hat{u}_{p,i} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \bar{\alpha}_p (\widehat{u_{p,i} u_{p,j}} - \hat{u}_{p,i} \hat{u}_{p,j}) \end{aligned} \quad (2.97)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{h}_p + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{h}_p \hat{u}_{p,j} &= -\pi \bar{n}_p \check{d}_p \bar{N} u \bar{\lambda} (\hat{T}_p - \tilde{T}) - \bar{\Gamma} \hat{h}_{s,F}(\hat{T}_p) \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \bar{\alpha}_p (\widehat{u_{p,j} h_p} - \hat{u}_{p,j} \hat{h}_p) \end{aligned} \quad (2.98)$$

On précise ici que tous les termes relatifs au mouvement décorrélé ont été négligés suite aux simplifications faites dans la section 1.2. Ainsi le terme $-\frac{\partial}{\partial x_j} \rho_p \bar{\alpha}_p \left(\frac{2}{3} \widehat{\delta \theta_p} \delta_{ij} + \widehat{\delta R_{p,ij}^*} \right)$ n'a pas été écrit dans l'équation de quantité de mouvement (2.97) et l'équation d'énergie décorrélée filtrée n'a pas été développée. Son expression, ainsi que les fermetures des termes de sous-maille, peuvent être trouvés dans les thèses de Moreau [?], Riber [?] et Boileau [?].

Le temps de relaxation est lui aussi obtenu en utilisant uniquement les grandeurs filtrées :

$$\bar{\tau}_p \approx \left(1 + 0.15 \overline{Re}_p^{0.687}\right) \frac{\rho_p \check{d}_p^3}{18\mu} \quad (2.99)$$

$$\text{avec } \overline{Re}_p \approx \frac{\|\vec{u} - \vec{u}_p\| \check{d}_p}{\bar{\nu}} \quad (2.100)$$

On note que les termes sources filtrés (traînée, évaporation, conduction) ne font intervenir *que les grandeurs filtrées* dans leurs expressions. On néglige ainsi tout terme de sous-maille dans leur cas. Le lecteur peut trouver plus de détails sur ces approximations dans la thèse de M.Boileau [?].

Deux termes de sous-maille apparaissent dans les équations (2.97) et (2.98) :

- $\overline{\tau}_{p,ij}^t$ est le tenseur des contraintes de sous-maille pour la phase dispersée, apparaît dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement (2.97) et s'exprime de la manière suivante :

$$\overline{\tau}_{p,ij}^t = -\rho_p \bar{\alpha}_p (\widehat{u_{p,i} u_{p,j}} - \widehat{u}_{p,i} \widehat{u}_{p,j}) \quad (2.101)$$

- $\overline{q}_{h,i}^t$ est le vecteur flux de sous-maille d'enthalpie sensible corrélée :

$$\overline{q}_{h,i}^t = \rho_p \bar{\alpha}_p (\widehat{u_{p,j} \delta \theta_p} - \widehat{u}_{p,j} \widehat{\delta \theta_p}) \quad (2.102)$$

Les termes de sous-maille d'enthalpie seront par la suite considérés comme négligeables donc on pose : $\overline{q}_{h,i}^t = 0$. Il reste donc à fermer : $\overline{\tau}_{p,ij}^t$.

2.3.2 Modèle pour le tenseur des contraintes de sous-maille $\overline{\tau}_{p,ij}^t$

A l'instar des tensions de Reynolds dans l'équation filtrée de quantité de mouvement de la phase porteuse, il apparaît le terme $\overline{\tau}_{p,ij}^t$ dans l'équation (2.97). Par analogie avec les modèles LES utilisés pour la phase porteuse, Riber et al. [?] proposent de modéliser le tenseur de sous-maille $\overline{\tau}_{p,ij}^t$ par un modèle de viscosité de type Smagorinsky. Néanmoins, le comportement de la phase discrète, comme on l'a évoqué dans le chapitre 1, est similaire à celui d'un fluide très compressible (les clusters de particules évoquant les chocs). La partie dilatation des vitesses mésoscopiques étant non négligeable, Riber et al [?] ont proposé de modéliser les effets de compression de sous-maille à l'aide du modèle de Yoshizawa. Le tenseur des contraintes de sous-maille pour la phase dispersée est donc modélisé comme suit :

$$\overline{\tau}_{p,ij}^t = \underbrace{\frac{2}{3} \rho_p \bar{\alpha}_p C_{p,Y} \Delta^2 |\widehat{S}_p|^2 \delta_{ij}}_{\text{Terme Yoshizawa}} - \underbrace{2 \rho_p \bar{\alpha}_p (C_{p,S} \Delta)^2 |\widehat{S}_p^*| \widehat{S}_p^*}_{\text{Terme Smagorinsky}} \quad (2.103)$$

$$= p_{p,t} \delta_{ij} - 2 \rho_p \bar{\alpha}_p \nu_{p,t} \widehat{S}_{p,ij}^* \quad (2.104)$$

et la norme de \widehat{S}_p est donnée par : $|\widehat{S}_p| = \sqrt{2 \widehat{S}_{p,ij} \widehat{S}_{p,ij}}$. Les tenseurs des taux de déformations pour la phase dispersée sont ici définis par :

$$\begin{aligned} \widehat{S}_{p,ij}^* &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widehat{u}_{p,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widehat{u}_{p,j}}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \widehat{u}_{p,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \\ \widehat{S}_{p,ij} &= \widehat{S}_{p,ij}^* + \frac{1}{3} \frac{\partial \widehat{u}_{p,k}}{\partial x_k} \delta_{ij} \end{aligned}$$

Les constantes du modèle ont été déterminées par Moreau et al [?] sur des tests *a priori* en turbulence homogène isotrope et on a : $C_{p,Y} = 0.116$ et $C_{p,S} = 0.16$.

A l'instar de ce qu'on a fait pour la phase gazeuse, on peut écrire les équations de la phase dispersée sous une forme compacte. Le vecteur des variables conservatives est :

$$\bar{\mathbf{U}}_p = (\bar{n}_p, \rho_p \bar{\alpha}_p, \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p, \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{v}_p, \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{w}_p, \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{h}_p)^T$$

et l'équation sous forme compacte peut s'écrire :

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{U}}_p}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_p = \bar{\mathbf{S}}_{f-p} \quad (2.105)$$

avec :

$$\bar{\mathbf{F}}_p^C = \begin{pmatrix} \bar{n}_p \hat{u}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p \hat{u}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p \hat{v}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{h}_p \hat{u}_p \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{G}}_p^C = \begin{pmatrix} \bar{n}_p \hat{v}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{v}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p \hat{v}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{v}_p \hat{v}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{v}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{h}_p \hat{v}_p \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{H}}_p^C = \begin{pmatrix} \bar{n}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{u}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{v}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{w}_p \hat{w}_p \\ \rho_p \bar{\alpha}_p \hat{h}_p \hat{w}_p \end{pmatrix}, \quad (2.106)$$

et les flux turbulents sont :

$$\bar{\mathbf{F}}_p^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\overline{\tau_{p,xx}}^t \\ -\overline{\tau_{p,xy}}^t \\ -\overline{\tau_{p,xz}}^t \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{G}}_p^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\overline{\tau_{p,xy}}^t \\ -\overline{\tau_{p,yy}}^t \\ -\overline{\tau_{p,yz}}^t \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{H}}_p^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\overline{\tau_{p,xz}}^t \\ -\overline{\tau_{p,yz}}^t \\ -\overline{\tau_{p,zz}}^t \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.107)$$

2.3.3 Termes sources pour la phase gazeuse

Il reste à expliciter les termes sources de couplage pour le gaz, c'est-à-dire les termes sources qui apparaissent en plus dans l'équation (2.92) et traduisent les effets de la phase dispersée (traînée, conduction thermique, vaporisation) sur la phase porteuse. Ceux-ci s'écrivent [?] :

$$\bar{\mathbf{S}}_{p-f} = \begin{pmatrix} \bar{\Gamma} \hat{u} - \frac{\rho_p \bar{\alpha}_p}{\bar{\tau}_p} (\tilde{u} - \hat{u}_p) \\ \bar{\Gamma} \hat{v} - \frac{\rho_p \bar{\alpha}_p}{\bar{\tau}_p} (\tilde{v} - \hat{v}_p) \\ \bar{\Gamma} \hat{w} - \frac{\rho_p \bar{\alpha}_p}{\bar{\tau}_p} (\tilde{w} - \hat{w}_p) \\ \bar{\Gamma} h_{s,k} (\hat{T}_p) \delta_{pk} + \pi \bar{n}_p \bar{d}_p \bar{N} u \bar{\lambda} \left(\hat{T}_p - \hat{T} \right) + \tilde{u}_i \left(\bar{\Gamma} \hat{u}_i - \frac{\rho_p \bar{\alpha}_p}{\bar{\tau}_p} (\tilde{u}_i - \hat{u}_{p,i}) \right) \\ \bar{\Gamma} \delta_{pk} \end{pmatrix} \quad (2.108)$$

et $\delta_{pk} = 1$ si les particules p sont constituées du composant k , $\delta_{pk} = 0$ sinon (dans ce manuscrit, il s'agira du carburant noté avec l'indice F). On a évidemment : $\bar{\mathbf{S}}_{p-f} = -\bar{\mathbf{S}}_{f-p}$.

2.3.4 Combustion et modification du terme d'évaporation

Le plissement dû à la turbulence a pour effet d'augmenter la surface de flamme et, par conséquent, le taux de réaction intégral. Le modèle de flamme épaissie permet de tenir compte du plissement provoqué par les tourbillons de sous-maille. L'effet de la turbulence en présence d'un écoulement diphasique n'est pas évident. Le taux de réaction dépend, en effet, de la vitesse de réaction chimique et du taux d'évaporation des gouttes de fuel [?]. Ce dernier dépend fortement de la température du gaz environnant et, lorsque la combustion est hétérogène, l'essentiel de l'évaporation peut se produire dans le front de flamme. Toutefois, il n'est pas évident que la relation entre le plissement et le taux d'évaporation soit similaire à celle entre plissement et taux de réaction. N'ayant aucune précision concernant ce phénomène, on n'inclura donc pas les effets du plissement sur l'évaporation. En pratique, le modèle TFLES consiste à corriger les termes de transfert de masse et de chaleur entre les deux phases en divisant par le facteur d'épaississement \mathcal{F} [?] afin de garder la même structure que la flamme non épaissie.

$$\bar{\Gamma} \rightarrow \frac{\bar{\Gamma}}{\mathcal{F}} \quad (2.109)$$

$$\bar{\lambda} \rightarrow \frac{\bar{\lambda}}{\mathcal{F}} \quad (2.110)$$

Cette méthode, testée par A.Kaufmann [?], permet d'obtenir des flammes épaissies exactement similaires, à un facteur \mathcal{F} près, aux flammes non épaissies.

Deuxième partie

Présentation et analyse numérique des schémas pour la LES de la combustion diphasique

Table des matières

3	Méthodes numériques pour la LES - Introduction	77
3.1	Schémas numériques pour la simulation aux grandes échelles	78
3.1.1	Maillages	78
3.1.2	Méthodes numériques pour les LES dans les géométries simples	79
3.1.3	Méthodes numériques pour les LES dans les géométries complexes	83
3.1.4	Cas particuliers : transport de scalaires et écoulements compressibles à nombres de Mach élevés	84
3.1.5	Autres méthodes numériques	85
3.2	Travail de la partie II	86
3.3	Tableau récapitulatif des schémas étudiés pendant cette thèse	86
4	Méthodes numériques pour la LES - le code AVBP	89
4.1	Introduction	89
4.1.1	Le code AVBP	89
4.1.2	Méthodes <i>cell-vertex</i> et ses concurrentes	89
4.2	Nomenclature	93
4.3	Equations résolues et calcul des métriques	94
4.3.1	Equations sous forme compacte	94
4.3.2	Discrétisation du domaine de calcul	95
4.3.3	Métriques	96
4.3.4	Calcul du résidu et équations aux noeuds	97
4.4	Les différents schémas de convection <i>cell-vertex</i>	98
4.4.1	Différences centrées (DC ou CV)	99
4.4.2	Lax-Wendroff (LW)	99
4.5	Méthodes des résidus distribués et éléments finis	101
4.5.1	Introduction	101
4.5.2	Méthodes <i>fluctuation splitting</i>	102
4.5.3	Schémas décentrés	103
4.5.4	Lien avec les éléments finis	106
4.5.5	Matrice de masse et intégration temporelle	108
4.5.6	Cas des systèmes d'équations non linéaires	109
4.6	Schémas de la famille Taylor-Galerkin	112

TABLE DES MATIÈRES

4.6.1	Euler-Taylor-Galerkin (ETG) pour la convection scalaire	112
4.6.2	Famille des schémas <i>Two-Step Taylor Galerkin</i> (TTG) - Système d'équations de conservation	115
4.6.3	Implantation dans AVBP	118
4.7	Schémas de convection pour la partie diphasique	119
4.8	Termes de diffusion	120
4.8.1	Opérateur <i>cell-vertex</i> (4Δ)	120
4.8.2	Opérateur (2Δ) - Méthode de Galerkin	122
4.9	Calcul des termes sources	123
4.10	Discretisation temporelle	125
4.10.1	Avancements temporels	125
4.10.2	Calcul du pas de temps	126
4.11	Viscosité artificielle	129
4.11.1	Viscosité artificielle du second ordre	129
4.11.2	Viscosité artificielle du quatrième ordre	131
4.11.3	Application des opérateurs de viscosité artificielle	132
4.11.4	Viscosités de compression	134
4.12	Schémas de bords et conditions aux limites	135
4.12.1	Schémas de bords	135
4.12.2	Conditions limites	137
5	Analyse de stabilité théorique et pratique des schémas de convection d'AVBP sur des cas tests académiques - domaine périodique	143
5.1	Présentation du problème et notations	144
5.2	Analyse spectrale et équation résolue - étude monodimensionnelle	145
5.2.1	Quelques définitions	145
5.2.2	Analyse de Fourier et méthode de Von Neumann	147
5.2.3	Méthode de l'équation modifiée ou résolue	153
5.2.4	Application aux schémas d'AVBP	154
5.2.5	Diffusion ou Dissipation	158
5.3	Cas multidimensionnels	167
5.3.1	Anisotropie	167
5.3.2	Stabilité	168
5.4	Comparaisons des schémas d'AVBP- expériences numériques	170
5.4.1	Convection	171
5.4.2	Vortex	179
5.4.3	Onde acoustique linéaire	181
5.4.4	Viscosité artificielle	182
5.5	Conclusions et discussions	184
5.5.1	Sur les schémas d'AVBP	184
5.5.2	Sur leurs limitations concernant la résolution de la phase dispersée	186
5.5.3	Une voie de développement	186

6	Analyse de stabilité théorique et pratique des schémas de convection d'AVBP sur des cas tests académiques - influence des conditions limites	189
6.1	Cavité acoustique 1D	190
6.1.1	Présentation du problème	190
6.1.2	Résultats avec le code AVBP	191
6.1.3	Différences entre les conditions limites	193
6.2	Méthode de la matrice d'amplification	194
6.2.1	Principe	194
6.2.2	Etude de stabilité	195
6.2.3	En pratique...	196
6.3	Application aux schémas d'AVBP	196
6.3.1	Equations d'Euler linéarisées	196
6.3.2	Discrétisation au centre du domaine	197
6.3.3	Conditions limites et termes de bord	198
6.3.4	Discrétisations aux bords	200
6.4	Résultats et comparaisons avec AVBP	203
6.4.1	Conditions de Dirichlet	203
6.4.2	Conditions caractéristiques	203
6.4.3	Conclusion	205
6.5	Améliorations possibles de la précision globale des schémas	206
6.5.1	Dérivées premières plus précises	206
6.5.2	Intégration temporelle d'ordre 2 aux bords	207
6.6	Conclusions	208
7	Application au foyer MERCATO (chambre de combustion académique)	211
7.1	Introduction - Contexte	211
7.2	Configurations	212
7.2.1	Configuration de base	212
7.2.2	Injecteur	213
7.2.3	Aval de la chambre	213
7.3	Géométrie A - écoulement monophasique	216
7.3.1	Caractéristiques du maillage et point de fonctionnement	216
7.3.2	Structure de l'écoulement	219
7.3.3	Comparaison entre les différents schémas numériques	234
7.3.4	Conclusions	239
7.4	Géométrie B - écoulement diphasique réactif	240
7.4.1	Conditions limites et initiale - partie gazeuse	240
7.4.2	Conditions limites et initiale - partie liquide	241
7.4.3	Maillage	243
7.4.4	Paramètres numériques	244
7.4.5	Chimie PEA	245
7.4.6	Grandeurs caractéristiques de l'écoulement	248
7.4.7	Structure de l'écoulement	248

TABLE DES MATIÈRES

7.4.8	Dispersion du carburant - Températures	255
7.4.9	Structure de flamme	258
7.4.10	Scénario de combustion	264
7.4.11	Calculs de viscosités	266
7.4.12	Conclusions	267

Chapitre 3

Méthodes numériques pour la LES - Introduction

La deuxième partie de ce manuscrit est consacrée à l'étude des méthodes numériques utilisées pour résoudre les systèmes d'équations permettant de décrire la combustion turbulente, diphasique et instationnaire. La simulation des grandes échelles de la turbulence (LES ou SGE) est l'outil qui a été choisi pour toutes les qualités dont il fait preuve et qui ont été énumérées dans la première partie. On peut distinguer deux types de LES de la combustion turbulente (diphasique ou non) :

- **LES dans les géométries simples** : l'objectif est d'étudier principalement les phénomènes fondamentaux qui se produisent dans ou près des flammes (interaction avec la turbulence, acoustique...). Les simulations sont très proches des DNS car réalisées dans des géométries très simples (domaines cubiques périodiques, canaux cylindriques ou parallélépipédiques...).
- **LES dans les géométries complexes** : il s'agit de simuler les écoulements réactifs dans des chambres de combustion plus ou moins complexes (de la chambre "académique" avec alimentation simple au brûleur industriel avec tourbillonneurs, films de refroidissement, contournements, parois multiperforées...).

La principale différence entre ces deux types de LES est le maillage que l'utilisateur va pouvoir employer. Dans le premier cas, les grilles sont structurées, le plus souvent orthogonales et généralement simples à mettre en place. Au contraire, les maillages utilisés pour les LES en géométries complexes sont majoritairement non structurés, composés le plus souvent d'éléments tétra- et/ou hexaédriques et peuvent demander plusieurs jours à semaines de travail pour les concevoir. Les données ne sont donc pas stockées de la même manière. De plus, les exigences en termes de performances ne sont pas du tout les mêmes. Ainsi, l'écriture de schémas numériques pour un type ou l'autre de LES est très différente. Dans ce chapitre et les 3 suivants, on va s'intéresser en particulier **aux schémas de convection**, car ce sont les plus susceptibles d'introduire des erreurs numériques et de générer des instabilités (donc la divergence du calcul). On présente ainsi différentes manières de caractériser un schéma (domaine de stabilité, précision...) et on introduit les différents types d'erreurs que peuvent engendrer les discrétisations et en particulier : *diffusion* ou *dissipation*¹ et *dispersion*.

Comme l'indiquent Oran et Boris[?], les termes *diffusion* et *dissipation* sont souvent utilisés pour désigner la même manifestation qu'est l'**erreur en amplitude** due au schéma numérique. D'un point de vue thermodynamique, pourtant, il s'agit bien de deux phénomènes différents. D'une manière rigoureuse, le terme le plus exact pour désigner l'erreur en amplitude correspond à la diffusion. Toutefois, comme le font la majorité des auteurs d'ouvrages de référence sur les méthodes numériques, on ne fera pas de distinction entre les deux termes.

3.1 Schémas numériques pour la simulation aux grandes échelles

3.1.1 Maillages

On peut distinguer deux types de maillages [?]. Ceux-ci se différencient principalement par la manière dont sont structurées les données (géométrie, solutions).

Structurés

Les maillages structurés (figure 3.1) proviennent de la méthode des différences finies et peuvent être aussi utilisés dans le cadre des volumes finis. Tout noeud ou point du maillage peut se définir comme l'intersection de deux (ou trois en 3D) familles de lignes. Il est donc aisé de connaître et de faire intervenir un grand nombre de points pour réaliser les discrétisations. Ces maillages peuvent être rectilignes ou curvilignes. Il est très courant d'utiliser les coordonnées cartésiennes mais les maillages en coordonnées cylindriques ne sont pas rares.

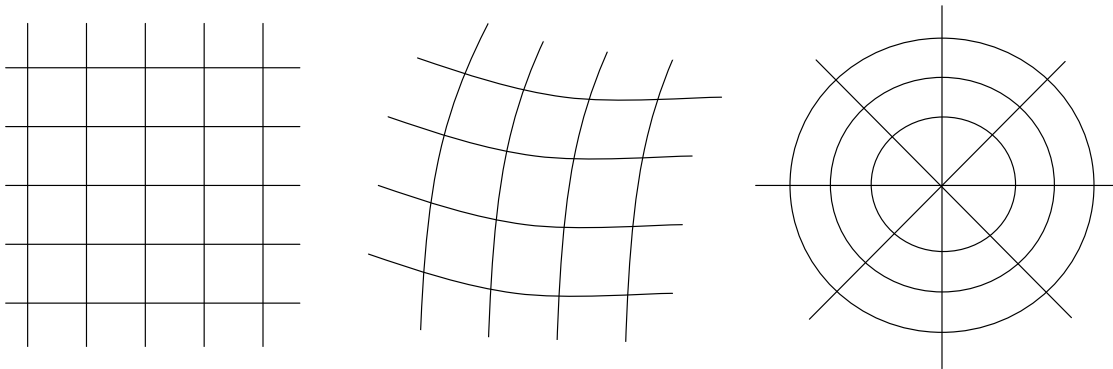


FIG. 3.1 - Trois exemples de maillages structurés. De gauche à droite : une grille cartésienne, curviligne et cylindrique.

Non-structurés

Les maillages non-structurés (figure 3.2) proviennent de la méthode des éléments finis. Le plus souvent, ils sont la combinaison d'éléments triangulaires et/ou quadrangulaires (ou tétraédriques et/ou hexaédriques), voire d'éléments plus complexes. Les noeuds ne peuvent pas être définis comme l'intersection de familles de lignes. A l'inverse des maillages précédents, il est généralement difficile (ou plutôt coûteux !) d'utiliser des noeuds très "éloignés" (non connectés entre eux par l'arête d'une cellule), ce qui peut limiter la précision des discrétisations.

Contrairement aux maillages structurés, un noeud ne peut donc pas être défini par un ensemble de deux (ou trois) entiers et doit donc être numéroté individuellement. De ce fait, il est nécessaire de lister les noeuds constituant chaque élément (numéroté lui-aussi). Les tableaux permettant de connaître ces liens entre noeuds et éléments sont appelés *tableaux de connectivité*.

On parle de maillages *hybrides* lorsque ceux-ci sont composés de plusieurs types d'éléments différents

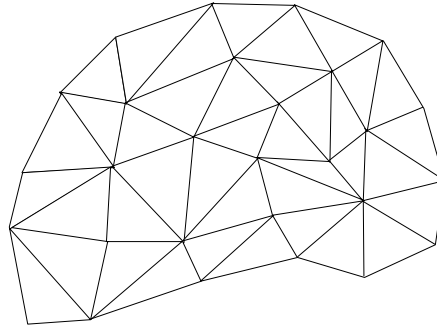


FIG. 3.2 - Exemple de maillage non structuré composé uniquement de triangles.

(par exemple, tétraèdres et hexaèdres). En général, les différents éléments utilisés sont limités aux éléments canoniques tels qu'on les présente dans la section 4.3, comme dans AVBP, mais certains solveurs sont capables de traiter des éléments totalement quelconques (comme le code CEDRE de l'ONERA). L'intérêt des maillages hybrides est la possibilité d'utiliser les avantages de chacun des éléments. Les éléments hexaédriques permettent pour un nombre de noeuds donné de diminuer le nombre de cellules (dans un hexaèdre, donc 8 noeuds, on peut avoir 5 ou 6 tétraèdres). Certaines situations nécessitent l'emploi des hexaèdres comme la résolution d'une couche limite : Auffray [?] a mis en évidence la supériorité très nette des quadrangles / hexaèdres devant les triangles / tétraèdres (très étirés et irréguliers dans de tels cas). En revanche, les tétraèdres permettent de raffiner / déraffiner beaucoup plus facilement le maillage. Par ailleurs, les tétraèdres permettent de réaliser des maillages relativement isotropes, à l'inverse des hexaèdres, ce qui peut s'avérer être un avantage non négligeable sauf lorsqu'on sait, à l'avance, qu'une direction est privilégiée dans l'écoulement. Une conséquence est que les tétraèdres souffrent beaucoup moins des *wiggles* que les hexaèdres.

3.1.2 Méthodes numériques pour les LES dans les géométries simples

La précision est le maître mot qui doit caractériser les schémas numériques utilisés dans ce type de calcul. En effet, pour simuler les phénomènes très fins se produisant au niveau des flammes, la discrétisation doit interagir le moins possible avec la physique. Ainsi, la dissipation numérique doit être la plus faible possible, voire nulle, pour ne pas fausser les transferts d'énergie entre les différentes échelles de la turbulence résolue et la dissipation visqueuse introduite par le modèle de viscosité turbulente. Par ailleurs, l'erreur de dispersion due à la discrétisation - qui peut modifier de façon dramatique la vitesse de propagation des ondes (de quelque nature qu'elles soient) - doit être minimale et le domaine de longueur d'onde pour lequel cette erreur est négligeable, voire nulle, doit être le plus large possible. Les schémas employés sont généralement basés sur la méthode des différences finies (ou une formulation des volumes finis très proche) sur des maillages structurés, la plupart du temps très réguliers. On va évoquer deux méthodes couramment employées pour réaliser des approximations très précises des dérivées spatiales.

Schémas compacts

Les schémas compacts [?], appelés aussi schémas Hermitiens ou schémas de Padé, ont des propriétés spectrales (erreur de dispersion) bien supérieures aux méthodes aux différences classiques d'ordre de convergence similaire. Ils sont implicites en espace et leur formulation générale est la suivante [?] :

$$\sum_{k=-N_l}^{N_r} a_k \frac{\partial^n u}{\partial x^n} \Big|_{j+k} = \frac{1}{h^n} \sum_{k=-M_l}^{M_r} b_k u_{j+k} \quad (3.1)$$

où j est le noeud où est calculée la dérivée n -ième par rapport à x , $\frac{\partial^n u}{\partial x^n}$, d'un scalaire u est calculée. h est le pas d'espace et N_l et M_l (*resp.* N_r et M_r) est le nombre de points utilisés à gauche (*resp.* à droite) de j . La formule (3.1) est uniquement valable pour des maillages uniformes (pas d'espace constant) mais des développements ont été aussi réalisés pour des maillages non-uniformes. Pour la formulation classique des dérivées suivant la méthode des différences finies, seul le coefficient a_0 est différent de zéro dans le membre de gauche. La formule précédente s'écrit sous forme matricielle :

$$[A] \left\{ \frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right\} = [B] \{u\} \quad (3.2)$$

et les matrices $[A]$ et $[B]$ sont construites avec les coefficients a_k et b_k de l'équation (3.1). Ces matrices sont donc creuses (diagonales, tri-, penta-diagonales...etc) avec des propriétés souvent avantageuses (symétriques ou antisymétriques par exemple). Un des points importants demeure la nature implicite de l'opérateur puisque pour exprimer la dérivée n -ième en j , il faut inverser $[A]$. Toutefois, le coût de calcul supplémentaire est souvent largement compensé par les performances des schémas obtenus.

De nombreuses équipes de recherche utilisant ce type de schémas et plusieurs applications ont démontré et confirmé leurs qualités [?, ?, ?, ?, ?], en particulier pour réaliser des DNS. En règle générale, ces schémas sont associés à des intégrations temporelles explicites de type Runge-Kutta ou Adams-Bashforth ² [?].

On s'intéresse plus particulièrement au cas $n = 1$. La majorité du temps, les schémas compacts utilisés pour exprimer les dérivées premières (terme de convection) sont centrés afin d'être non dissipatifs. Bien qu'il ait été mis en évidence par Mittal et Moin [?] qu'un schéma amont ne devrait pas être utilisé dans le cadre d'une LES, à cause de la viscosité numérique introduite par le décentrement, Sengupta [?] indique qu'un schéma compact amont d'ordre élevé permet d'obtenir d'excellents résultats (l'erreur de dispersion est encore plus faible, la résolution spectrale est donc accrue) et d'améliorer la robustesse du schéma de façon sensible, en limitant les effets d'*aliasing* qu'on évoquera chapitre 5 (seules les très hautes fréquences, généralement d'origine numérique, sont dissipées ; ainsi la dissipation numérique ne semble pas avoir un effet très sensible sur la physique) sans pour autant nuire au transfert d'énergie turbulente.

²D'après Sengupta [?], l'utilisation d'une intégration temporelle de type Adams-Bashforth est à proscrire en DNS - et pourtant très utilisée - car elle peut dissiper les instabilités physiques et souffre d'une erreur de dispersion non négligeable, du fait de la forme particulière de son coefficient d'amplification.

Schémas totalement conservatifs

Cette appellation fait référence aux schémas numériques centrés qui conservent discrètement non seulement la grandeur u transportée, mais aussi son carré u^2 . Ils ont été développés en suivant les principes de la méthode de l'énergie [?]. Prenons un exemple très simple pour illustrer l'intérêt de cette caractéristique. En simplifiant au maximum l'opérateur de convection des équations de Navier-Stokes, on obtient l'équation de convection linéaire monodimensionnelle homogène et à coefficient constant :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (3.3)$$

en multipliant par u , on obtient :

$$u \frac{\partial u}{\partial t} + cu \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (3.4)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial u^2}{\partial t} + \frac{c}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} = 0 \quad (3.5)$$

Cela signifie que lorsqu'une grandeur est transportée et conservée, son carré (l'énergie) l'est aussi. Ceci est vrai pour n'importe quelle dimension. De la même manière, on peut montrer [?, ?] que l'énergie cinétique doit être conservée (lorsque la densité est constante et sans compter les termes de dissipation visqueuse physique). L'idée est donc de développer des schémas permettant de conserver les carrés des grandeurs qu'ils transportent. Si on note A l'opérateur discret tel que :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_j \simeq Au_j$$

alors on veut :

$$u_j Au_j = \frac{1}{2} A(u_j)^2$$

ce que majorité des schémas ne vérifie pas !

Un schéma aux différences centrées d'ordre 2 a cette propriété. Cependant, comme l'indiquent Morinishi et al [?], sa précision demeure insuffisante et une LES nécessite alors un nombre de points considérables, donc un coût de calcul parfois prohibitif. Pour remédier à ce problème, ils ont construit, sur maillages décalés (ou *staggered* - pression et vitesses ne sont pas stockés aux mêmes endroits, selon les idées de Harlow et Welch [?], figure 3.3), des schémas d'ordre élevé (de n'importe quel ordre en fait !) ayant ces propriétés en utilisant des combinaisons entre des opérateurs d'interpolation (qu'on écrit pour un maillage monodimensionnel) :

$$\bar{u}^{nx}|_x = \frac{u(x + nh/2) + u(x - nh/2)}{2} \quad (3.6)$$

et des opérateurs de différenciation :

$$\left. \frac{\delta_n u}{\delta_n x} \right|_x = \frac{u(x + nh/2) - u(x - nh/2)}{nh} \quad (3.7)$$

Ham [?] a généralisé ce travail pour des maillages non réguliers et Morinishi et al [?] pour des maillages cylindriques. Ces schémas sont donc non dissipatifs et ne perturbent pas les transferts d'énergie liés à la turbulence. Le caractère conservatif et non dissipatif doit aussi être assuré par l'avancement

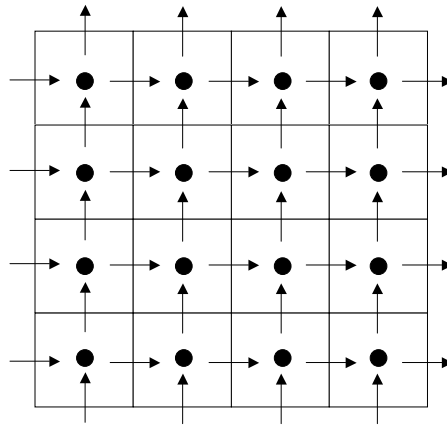


FIG. 3.3 - Exemple d'un maillage décalé. Pression, densité et scalaires sont stockés aux centres des volumes de contrôle (indiqués par ●). Ici, les vitesses sont stockées aux faces et indiquées par les flèches → et ↑.

temporel. Ainsi, ces opérateurs spatiaux sont le plus souvent associés au schéma implicite Crank-Nicolson, qui présente cette particularité.

L'autre intérêt (et c'est peut-être le plus important !) est la stabilité linéaire et non linéaire de ces schémas. Le carré d'une grandeur représente l'énergie associée et permet d'écrire sa norme L^2 ³. L'énergie étant transportée correctement et restant bornée implique que la norme L^2 est aussi bornée ce qui assure la stabilité des calculs [?].

La principale application de ces schémas est l'étude des écoulements turbulents incompressibles, du fait de leur capacité à conserver l'énergie cinétique (qui est l'énergie la plus représentative de l'écoulement dans ce cas). Toutefois, Pierce [?] et Wall [?] ont aussi utilisé ces schémas avec succès pour la simulation d'écoulements compressibles (où l'énergie la plus représentative est l'énergie totale, qui est une grandeur transportée) et la combustion turbulente.

Quel que soit le type d'écoulement étudié, ces schémas privilégient donc clairement l'aspect 'non-dissipation' au détriment de la 'non-dispersion', partant de l'argument classique (voir chapitre 9 - [?]) que le bilan d'énergie cinétique turbulente moyenne n'est pas modifié par la dispersion. Il faut noter, toutefois, que l'utilisation de maillages décalés a quelques vertus (pour certaines variables) en terme de dispersion car ils améliorent considérablement le nombre d'onde modifié du schéma numérique considéré [?].

Conclusions

Il existe bien évidemment d'autres alternatives, à commencer par les méthodes spectrales ou pseudo-spectrales [?, ?], mais les restrictions (domaines périodiques par exemple) sont importantes et ces méthodes, très coûteuses, sont plutôt destinées à la DNS.

³La définition est rappelée chapitre 5 et correspond à la somme sur tous les noeuds de l'énergie pondérée par le volume de contrôle associé.

Les schémas présentés ici ne sont utilisables (tels quels) que sur des maillages structurés où il est aisé d'utiliser des points qui ne sont pas directement liés au noeud sur lequel l'opérateur est calculé. Clairement, sur maillages non-structurés, la construction de ces schémas est très lourde et surtout prohibitive d'un point de vue coût de calcul. D'autres alternatives doivent donc être étudiées.

3.1.3 Méthodes numériques pour les LES dans les géométries complexes

La précision reste un critère important pour ces simulations. Toutefois, la robustesse devient cruciale car les sources d'instabilités numériques sont beaucoup plus nombreuses : les maillages sont non-structurés (ou structurés par blocs), avec des tailles de cellules très variables : les parois des chambres de combustion peuvent avoir des formes géométriques complexes (coins) et il peut y avoir une grande quantité de conditions d'entrée/sortie [?]. Les méthodes des différences finies sont remplacées par les volumes finis ou les éléments finis.

Le type de schéma le plus classique utilisé pour ces LES est le schéma volumes finis aux différences centrées, soit *centrés cellules*, soit *centrés sommets* (qu'on présente plus dans les détails au chapitre suivant), associé à des opérateurs de viscosité artificielle pour assurer la stabilité en présence de forts gradients. Il s'agit, en effet, de l'option la plus simple à mettre en oeuvre. Les schémas temporels sont généralement des méthodes Runge-Kutta explicites (avec au moins 3 étapes pour des raisons de stabilité) [?] ou Crank-Nicolson. On peut trouver aussi des exemples d'applications avec le schéma Lax-Wendroff [?, ?] et des dérivés [?].

Les différences centrées classiques, associées à ces avancements temporels, sont peu (ou pas du tout) dissipatives, mais leur précision peut dégénérer rapidement, dès que le maillage devient très irrégulier (ordre 2 à 1, voire moins !) et les erreurs de dispersion associées deviennent rapidement trop importantes. D'autres méthodes sont désormais assez répandues. Elles sont plus précises et plus robustes. On en présente certaines :

Schémas volumes finis totalement conservatifs

Il s'agit de l'adaptation des schémas présentés pour les LES en géométries simples. Le but est toujours de construire des opérateurs permettant de conserver le carré des grandeurs considérées. Ces opérateurs, ainsi que des applications, sont présentés par Mahesh et al [?, ?] et Ham et al [?, ?]. Ils ont fait l'objet d'une étude approfondie pendant cette thèse, qu'on ne présentera toutefois pas dans ce manuscrit (séjour d'un mois au CTR de l'Université de Stanford, sous la tutelle de Vincent Moureau, alors post-doctorant). Leur intérêt est le même que pour les LES en géométries simples, c'est-à-dire à la fois respecter une propriété mathématique importante et pourtant souvent omise, qu'est la conservation discrète de l'énergie (fidélité par rapport à la physique), ainsi qu'assurer la stabilité linéaire et non-linéaire du calcul, sans avoir à ajouter de viscosité artificielle (robustesse) [?, ?, ?, ?]. La discrétisation temporelle souvent associée est le schéma Crank-Nicolson, ce qui nécessite quelques ajustements pour la simulation d'écoulements compressibles à faible Mach [?, ?] (solveur basé sur la pression) et évite le préconditionnement de la matrice à inverser pour résoudre le problème, comme c'est le cas en général [?] avec les solveurs basés sur la densité.

Schémas volumes finis amont d'ordre élevé

L'INRIA [?, ?, ?] a développé des schémas volumes finis amont de type MUSCL à très faible dissipation (dissipation d'ordre 4 voire d'ordre 6 sur maillages réguliers). L'avantage est de cumuler des qualités propres aux schémas décentrés (erreur de dispersion faible et robustesse), tout en assurant un minimum de dissipation numérique, évitant ainsi d'interagir avec le modèle de turbulence. Ces schémas, construits en suivant les principes de la méthode de Galerkin (ayant donc des affinités avec les éléments finis lorsque le maillage est composé de simplexes), sont basés sur une formulation assez courante *centrés sommets* avec une connectivité aux arêtes, ce qui augmente considérablement leur intérêt.

Schémas à résidus distribués

Comme on le verra au chapitre suivant, cette catégorie de schémas englobe les volumes finis de type *cell-vertex* et tout schéma pouvant être formulé comme une méthode des éléments finis de *Petrov-Galerkin*⁴. Les applications de LES de ce type de schémas ont été principalement réalisées par le CERFACS [?, ?, ?, ?] mais on peut citer aussi les résultats obtenus par l'équipe de Fuchs de l'université de Lund [?, ?], utilisant, entre autre, le schéma amont LDA pour simuler des écoulements autour d'obstacles et obtenant avec d'excellents résultats.

Par ailleurs, une extension des schémas *cell-vertex* sont les méthodes éléments finis de type Taylor-Galerkin, comme on le verra section 4.6. Ces schémas numériques ont démontré tout leur potentiel pour réaliser des LES, en particulier en géométrie complexe [?, ?].

3.1.4 Cas particuliers : transport de scalaires et écoulements compressibles à nombres de Mach élevés

Jusqu'à présent, on a parlé des schémas numériques permettant la simulation d'écoulements turbulents. La principale qualité recherchée dans la discrétisation est sa capacité à interagir le moins possible avec les vrais phénomènes physiques, en particulier à apporter un minimum de dissipation numérique. Dans le cas d'écoulements réactifs, on est, en outre, amené à transporter des scalaires (passifs ou non), ce qui implique de respecter certaines propriétés supplémentaires et notamment, le fait que ces grandeurs sont le plus souvent bornées. De la même manière, dans le cas d'écoulements fortement compressibles (présence de chocs) ou d'écoulements diphasiques modélisés par une approche Eulérienne [?], l'emploi de solveurs de Riemann (exacts [?] ou approchés [?]) peut s'avérer nécessaire.

Dans le cas de géométries simples et de maillages structurés, on peut faire appel à différentes techniques :

- Schémas centrés combinés à des détecteurs de chocs et des viscosités d'ordre élevé [?, ?],
- Schémas amont (ou au moins biaisés amont) d'ordre élevé et de préférence ayant les propriétés de monotonie adéquates (QUICK [?], BQUICK [?], schémas TVD [?] ou encore ENO/WENO [?]).
- Schémas FCT d'ordre élevé [?]

On notera enfin que l'ajout de viscosité numérique dans les équations de transport de scalaires, impliqué par l'utilisation de ces stratégies, a moins d'impact sur l'interaction avec la turbulence car les transferts d'énergie ne sont plus non-linéaires [?, ?].

⁴voir section 4.5. Ceci est valable uniquement pour des simplexes.

Dans le cas de géométries complexes, le problème devient particulièrement ardu car les schémas précédemment cités emploient des *stencils*⁵ parfois larges, et adapter ces procédures à des maillages non structurés peut s'avérer très coûteux et complexe [?], bien que des procédures existent. Le plus souvent, les schémas centrés, décrits précédemment, sont combinés à divers opérateurs de viscosité artificielle afin de limiter un maximum les oscillations au niveau des forts gradients. Néanmoins, aucune garantie *a priori* n'est fournie par cette méthode et demande souvent à l'utilisateur de nombreuses tentatives avant d'obtenir un calcul stable et suffisamment précis. A ce titre, les schémas volumes finis amonts d'ordre élevé avec emploi de limiteurs adéquates, les méthodes Galerkin discontinues [?] ou les schémas à distribution de résidus amont peuvent s'avérer être des alternatives très intéressantes pour les géométries complexes.

3.1.5 Autres méthodes numériques

Que ce soit pour réaliser des LES en géométries simples ou complexes, il existe des alternatives démontrant un grand potentiel et basées sur des approches de la LES très différentes. On en présente brièvement deux en évoquant les schémas numériques correspondants.

Schémas à limiteurs de flux ou FCT pour la méthode MILES

Ici, l'approche traditionnelle LES qui consiste à modéliser le tenseur des contraintes de sous-maille est abandonnée. La méthode consiste à utiliser des schémas dissipant les petites échelles (approches décentrées MUSCL, PPM... avec limiteurs de flux ou encore méthodes avec correction de flux (FCT), le but étant d'assurer la monotonie spatiale et locale de la solution) de façon à ne pas avoir besoin d'utiliser de modèle de sous-maille [?, ?]. Un des avantages est d'éviter les erreurs de commutation (entre les opérateurs différentiels et le filtre) qui existent dans les méthodes classiques [?, ?, ?]. Les résultats obtenus démontrent clairement la capacité de la formulation MILES à produire de très bons résultats, ce qui en fait une alternative intéressante aux LES classiques.

Méthodes variationnelles multi-échelles

La VMM (*Variational Multiscale Method*) provient du constat que la méthode de Galerkin n'est pas robuste lorsqu'utilisée pour résoudre des problèmes dans lesquels apparaissent des phénomènes d'échelles très différentes. Le principe consiste alors à décomposer la solution en une partie 'grandes échelles' (*coarse scales*) résolue numériquement (et liée au maillage) et une partie 'échelles fines' (*fine scales*) résolue analytiquement (le maillage étant trop grossier). Comme le soulignent Calo [?] et Hughes (chapitre 2 -[?]), ce cadre se prête très bien à la LES. Par ailleurs, la VMM présente des liens très étroits avec les méthodes éléments finis stabilisés classiques, introduites par Brooks et Hughes [?] (avec le schéma SUPG) puis C.Johnson [?] en particulier, et destinées aux simulations de type RANS.

⁵Voir chapitre suivant pour une définition

3.2 Travail de la partie II

Dans la partie II de cette thèse, on décrit tout d'abord en détail les schémas numériques utilisés dans AVBP (discrétisations spatiales et centrées), ainsi que ceux implantés au cours de cette thèse, pour réaliser certains tests (chapitre 4). Le chapitre 5 présente différentes analyses, pratiques et théoriques, sur des domaines périodiques, permettant de caractériser les performances de ces schémas et de donner une idée des erreurs typiques qu'ils introduisent dans les calculs. Le chapitre 6 met en avant l'influence que peuvent avoir les bords du domaine de calcul et à quel point ils peuvent dégrader la solution et les performances des schémas. Enfin le chapitre 7 montre une application des méthodes présentées dans les deux premières parties sur une géométrie réelle.

3.3 Tableau récapitulatif des schémas étudiés pendant cette thèse

Le tableau 3.3 indique tous les schémas testés et/ou codés pendant cette thèse, ainsi que les acronymes auxquels on les associe.

Acronyme	Nom complet du schéma	Existant dans AVBP	Testé / codé dans AVBP	Famille -Réfs	Erreur locale en temps	Erreur locale en espace	Section dans cette thèse
DC ou CV	<i>Différences centrées</i>	OUI form. <i>cell-vertex</i>	testé étude prat. et théo.	VF <i>cell-vertex</i> EF Petrov Galerkin	-	$\mathcal{O}(h^2)$	4.4 - 5.2 - 5.4
LW	<i>Lax-Wendroff</i>	OUI form. <i>cell-vertex</i>	testé étude prat. et théo.	VF <i>cell-vertex</i> EF-Petrov Galerkin	$\mathcal{O}(\Delta t^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$	4.4 - 5.2 - 5.4 - 7.3
LW-EF	<i>Lax-Wendroff éléments finis</i>	OUI form. EF	testé étude prat. et théo.	EF-Galerkin	$\mathcal{O}(\Delta t^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$	5.4
Galerkin	<i>Galerkin éléments finis</i>	OUI form. EF	testé étude prat. et théo.	EF-Galerkin	-	$\mathcal{O}(h^4)$	4.5 - 5.4
ETG	<i>Euler-Taylor-Galerkin</i>	NON	non testé dans AVBP étude théo	Taylor-Galerkin EF-G ou EF-PG	$\mathcal{O}(\Delta t^3)$	$\mathcal{O}(h^3)$	4.6 - 5.2 - 5.4
TTG3	<i>Two step-Taylor-Galerkin</i>	OUI et NON form. EF	testé / codé étude théo.	Taylor-Galerkin EF-Galerkin	$\mathcal{O}(\Delta t^3)$	$\mathcal{O}(h^3)$	4.6 - 5.2
TTG4A	<i>Two step-Taylor-Galerkin '4A'</i>	OUI form. EF	testé / codé étude prat. et théo.	Taylor-Galerkin EF-Galerkin	$\mathcal{O}(\Delta t^3)$	$\mathcal{O}(h^3)$	4.6 - 5.2 - 5.2 - 7.3
TTG4B	<i>Two step-Taylor-Galerkin '4B'</i>	NON form. EF	testé / codé étude théo.	Taylor-Galerkin EF-Galerkin	$\mathcal{O}(\Delta t^3)$	$\mathcal{O}(h^3)$	4.6
TTGC	<i>Two step-Taylor-Galerkin 'C'</i>	OUI form. EF	testé étude prat. et théo.	Taylor-Galerkin EF-Galerkin	$\mathcal{O}(\Delta t^3)$	$\mathcal{O}(h^3)$	4.6 - 5.2 - 5.2 - 7.3
N	<i>Narrow</i>	NON	testé / codé étude prat.	Résidu distribué	-	$\mathcal{O}(h)$	4.5 - 5.4
LDA	<i>Low Diffusion A</i>	NON	testé / codé étude prat.	Résidu distribué	-	$\mathcal{O}(h) - \mathcal{O}(h^2)$	4.5 - 5.4
PSI	<i>Positive Streamwise Invariant</i>	NON	testé / codé	Résidu distribué	-	$\mathcal{O}(h) - \mathcal{O}(h^2)$	4.5 - 5.4
LW scalaire	<i>Lax-Wendroff form. RD</i>	NON	testé / codé étude théo. et prat.	Résidu distribué	$\mathcal{O}(\Delta t^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$	4.5 - 5.2 - 5.4
PSI-LW FCT	<i>PSI-Lax-Wendroff Flux-Corrected Transport</i>	NON	testé / codé étude prat.	Résidu distribué	$\mathcal{O}(\Delta t^2)$	$\mathcal{O}(h^2)$	4.5 - 5.4

Chapitre 4

Méthodes numériques pour la LES - le code AVBP

4.1 Introduction

4.1.1 Le code AVBP

Le code AVBP a été écrit à l'origine par l'OUCL (Oxford University Computing Laboratory) et le CERFACS en 1993. Il est désormais la propriété du CERFACS et de l'IFP qui le maintiennent et le développent conjointement. Le code a été créé dans le but d'avoir à disposition un solveur des équations de Navier-Stokes capable de supporter des maillages non structurés et hybrides (type de cellule arbitraire) afin d'assurer à l'utilisateur une flexibilité maximale lors de la discrétisation du domaine de calcul. La conception d'AVBP repose sur l'idée de construire une librairie de routines pour obtenir une modularité totale [?, ?, ?] et faciliter le développement et le codage de nouveaux modèles physiques. Il faut de plus noter qu'AVBP a été écrit, dès le départ, pour être utilisé sur des calculateurs parallèles (librairie COUPL, depuis remplacée par MPL) ce qui explique ses performances actuelles sur les super-calculateurs [?, ?, ?].

Les méthodes numériques du code AVBP ont été originellement implantées par M.Rudgyard et T.Schönfeld, en suivant les travaux réalisés, en particulier à Oxford [?, ?, ?, ?, ?], sur les méthodes volumes finis de type *cell-vertex*, qu'on présente dans la suite de ce chapitre.

4.1.2 Méthodes *cell-vertex* et ses concurrentes

La méthode des volumes finis permet de réaliser les discrétisations des lois de conservation décrites dans la partie I de cette thèse, dans leur formulation intégrale (que l'on écrit sans terme source pour le moment) :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{U} dV + \oint_{\partial\Omega} \vec{\mathcal{F}} \cdot \vec{n} dS = 0 \quad (4.1)$$

Dans le cas des équations d'Euler (ou de Navier-Stokes) pour les fluides compressibles, trois for-

mulations différentes (et quelques variantes) sont principalement utilisées. Les trois méthodes sont les suivantes :

- *cell-centre* (ou *-centred*) ou en français "centrée cellules",
- *vertex-centred* (ou parfois *node-based*) ou "centrée sommets",
- *cell-vertex* traduite parfois par "cellules et sommets".

Quelle que soit la méthode, la première étape reste identique. Il s'agit tout d'abord de discrétiser le domaine de calcul en un ensemble conforme de polygones (ou de polyèdres, selon la dimension) pour former le maillage :

$$\Omega = \bigcup_{K_e \in \mathcal{T}_h} K_e \quad (4.2)$$

Il faut noter qu'une confusion est souvent faite, comme le rappelle Schönfeld dans sa thèse de doctorat (page 31) [?]:

The terms "structured" and "unstructured" merely denote the data type employed for the description of the node connectivity, but do not necessarily contain information about the shape of the grid cells!

Cela signifie qu'un maillage composé d'éléments typiques des grilles structurées (carrés, cubes...) n'est pas forcément lui-même structuré. Le code AVBP ne gère **que les maillages non structurés et hybrides**.

Une fois le maillage disponible, l'équation (4.1) est discrétisée en espace et on écrit en général :

$$\boxed{\frac{d}{dt}(\mathbf{U}_e V_e) + \sum_{f|f \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_f \cdot \vec{S}_f = \mathbf{0}} \quad (4.3)$$

où V_e est la mesure du volume de contrôle K_e , \mathbf{U}_e peut être vue comme une moyenne de la quantité \mathbf{U} dans K_e , $\vec{\mathcal{F}}_f$ est le flux "numérique" (approximation du flux réel $\vec{\mathcal{F}}$) de \mathbf{U} à travers le côté (ou la face) f et \vec{S}_f la normale (pondérée par la longueur ou la surface de f) extérieure à K_e , associée à f . Il est à noter que la méthode des volumes finis, pour être *conservative*, doit assurer que le flux entrant par la face d'une cellule est égal au flux sortant par la face correspondante de la cellule adjacente. Ainsi, la variation temporelle de la variable \mathbf{U} est égale aux flux de cette variable à travers les bords du domaine Ω . De plus, la consistance selon la méthode des volumes est définie par :

$$\vec{\mathcal{F}}_f(\mathbf{U}, \mathbf{U}, \dots, \mathbf{U}) = \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}) \quad (4.4)$$

Dans la discussion qui suit, on va s'intéresser uniquement au terme spatial (le second dans l'équation (4.3)) pour lequel les différences entre les méthodologies sont les plus sensibles.

Méthode *cell-centre*

Cette formulation est la plus classique des trois et a été décrite en détails dans [?, ?, ?, ?, ?, ?, ?]. Les noeuds du maillage sont uniquement utilisés pour définir les délimitations des différents volumes de contrôle. Les lois de conservations sont appliquées dans les cellules du maillage et les variables sont stockées aux centres de ces éléments (figure (4.1)).

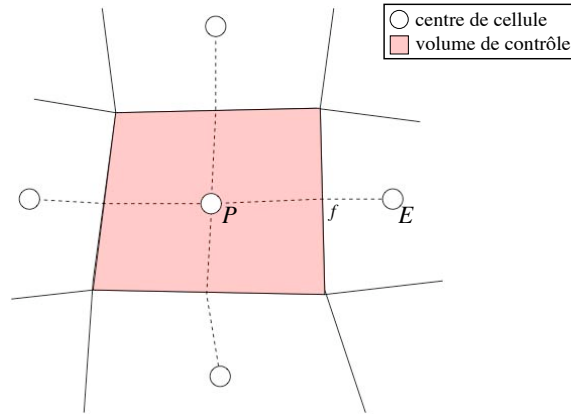


FIG. 4.1 - Maillage utilisé avec la méthode cell-centre . Les volumes de contrôle (coloriés) sont définis par les cellules, les variables stockées au centre de celles-ci.

Pour un schéma centré, en règle générale, le flux \vec{F}_f est défini (en 2D) de la manière suivante : $\vec{F}_f = \frac{1}{2}(\vec{F}(\mathbf{U}_P) + \vec{F}(\mathbf{U}_E))$. Il existe bien d'autres manières de définir le flux, dans le cadre des schémas décentrés (utilisation de séparateurs de flux [?], des solveurs approximatifs ou non de Godunov [?]) ou en introduisant une viscosité artificielle [?]. Sur maillage régulier, cette approximation permet d'obtenir une précision à l'ordre 2, mais elle dégénère dès que la taille de maille varie [?]. Morton et Paisley [?] ont montré que pour obtenir un ordre de convergence de 1 pour les flux convectifs, la variation de taille de mailles successives doit être en $1 + \mathcal{O}(h)$ et pour l'ordre 2 en $1 + \mathcal{O}(h^2)$, où h est une taille de maille caractéristique (soit $h = \text{diam}(K_e)$). Dans les inconvénients, ils ont aussi répertorié l'apparition de différents types d'oscillations numériques (ou *wiggles*) en damier. Enfin, on ajoutera que cette méthode est souvent vue comme une méthode des différences finies, appliquée à la formulation intégrale des lois de conservation [?].

Méthode vertex-centred

Cette formulation est assez proche de la précédente et la littérature la concernant est très riche [?, ?, ?, ?]. Là encore, les variables sont stockées aux centres des volumes de contrôle. Ici néanmoins, les variables sont définies aux noeuds. Les lois de conservation ne sont donc plus appliquées dans les cellules primales du maillage, comme dans le cas précédent, mais dans des cellules dites *duales* dont la définition peut varier (voir Barth [?, ?]). Une définition assez classique, appelée *duale médiane*, consiste à relier les centres des arêtes avec les centres des cellules (en 2D) comme sur la figure (4.2).

La définition du flux à la face se fait souvent de la même manière que pour la méthode *cell-centre*. De ce fait, on peut voir cette méthode comme très proche des différences finies et, *a priori*, sa précision peut dégénérer rapidement avec des maillages distordus. Par rapport à la méthode *cell-centre*, la formulation *vertex-centred* présente l'inconvénient d'avoir à définir deux maillages. Cependant, de nombreuses démonstrations ont montré le lien qui existe avec la méthode de Galerkin (donc les éléments finis) sur des maillages constitués d'éléments P1 (triangles ou tétraèdres), ce qui présente un avantage certain, d'un point de vue rigueur et précision [?, ?, ?, ?]. Par ailleurs, selon la métrique choisie (définition des normales, volumes de contrôle...), on peut même retrouver une discrétisation très proche de la méthode *cell-vertex* [?].

L'INRIA a construit de nombreux schémas numériques suivant une formulation *vertex-centred* à partir

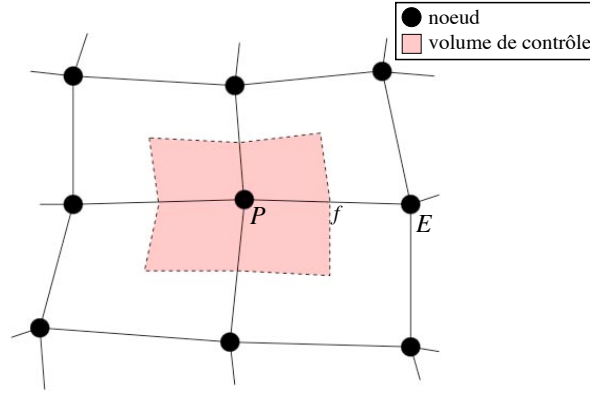


FIG. 4.2 - Maillage utilisé avec une méthode vertex-centred . Ici les volumes de contrôle (coloriés) sont définis par les cellules duales médianes, les variables sont stockées aux noeuds.

d'une connectivité basée aux arêtes [?, ?]. Certains en particulier sont d'ordre élevé et à dissipation faible [?] et applicables à la LES [?, ?]. Maintenir une précision d'ordre supérieur ou égal à deux demande, néanmoins, l'élargissement du stencil, ce qui augmente inévitablement le temps de calcul.

Méthode cell-vertex

La dernière méthode est décrite plus en détail dans la suite de ce chapitre puisqu'il s'agit de la méthode adoptée dans AVBP. Elle a été introduite par R-H.Ni [?], modifiée par Hall [?] et étudiée par divers auteurs et en particulier par l'équipe de K.W. Morton [?, ?, ?, ?, ?, ?, ?, ?]. Sur des maillages constitués de rectangles, elle correspond au schéma boîte (*box scheme*) de Keller. Elle se distingue des deux autres par le fait que les variables ne sont plus stockées au centre des volumes de contrôle (figure (4.3)). Les bilans des lois de conservation sont appliqués dans les cellules du maillage primal, alors que les solutions sont définies aux noeuds. Ainsi le flux à l'arête f est défini (en 2D) généralement de la manière suivante :

$$\vec{\mathcal{F}}_f = \vec{\mathcal{F}}\left(\frac{\mathbf{U}_A + \mathbf{U}_B}{2}\right) = \frac{1}{2}(\vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}_A) + \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}_B)),$$

ce qui revient à appliquer la méthode des trapèzes pour le calcul de l'intégrale de la partie spatiale de l'équation (4.1) (et assumer que les flux varient linéairement le long des arêtes). Ici le flux a donc été intégré le long des arêtes, contrairement à ce qui est fait avec les méthodes précédemment décrites (on calcule un flux avec une moyenne qui *traverse* la surface d'intégration). Ainsi, la méthode *cell-vertex* présente une forte affinité avec les éléments finis [?, ?]. De nombreuses études concernant la précision de cette méthode ont été réalisées [?]. On citera notamment celles de Roe [?], de Morton et Paisley [?] et de Swanson et Radespiel [?]. Des études beaucoup plus rigoureuses, d'un point de vue mathématique, ont été aussi réalisées par Morton, Stynes et Süli [?, ?]. Ils ont démontré que la méthode *cell-vertex* est plus précise que les deux autres et surtout, bien plus robuste aux distorsions de maillage. En effet, pour les dérivées d'ordre 1, elle converge au second ordre tant que le rapport de taille de mailles successives est en $1 + \mathcal{O}(h)$ et qu'il suffit que le rapport soit de $1 + \mathcal{O}(1)$ pour assurer l'ordre 1. Une autre manière d'exprimer un critère pour le second ordre est que : $\vec{x}_A - \vec{x}_B + \vec{x}_C - \vec{x}_D = \mathcal{O}(h^2)$, où \vec{x} sont les coordonnées des sommets A, B, C et D d'un quadrilatère.

Un des problèmes de la méthode *cell-vertex* reste que le nombre d'équations de bilan est différent du

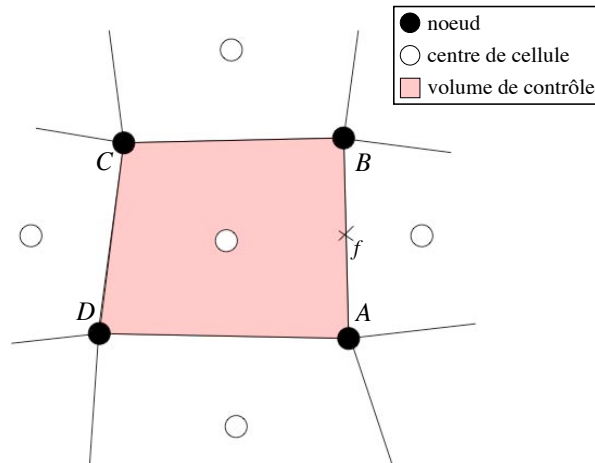


FIG. 4.3 - Maillage utilisé avec la méthode cell-vertex. Les volumes de contrôle (coloriés) sont définis par les cellules et les variables sont stockées aux noeuds.

nombre d'inconnues, ce qui nécessite d'écrire des équations nodales lors de la mise à jour temporelle [?, ?], ce qui peut s'avérer relativement coûteux. Par ailleurs, au même titre que les autres méthodes, la formulation *cell-vertex* souffre aussi de la présence de *wiggles* (oscillations en damiers), ce qui, là aussi, implique l'utilisation de viscosité artificielle, comme on le verra par la suite.

4.2 Nomenclature

Ce chapitre va faire appel à de très nombreuses notations. Pour assurer la clarté de la lecture, on va présenter les conventions adoptées principalement dans ce chapitre.

Variables

Il existe plusieurs types de vecteurs appartenant à différents espaces vectoriels.

- Le nombre de dimensions du domaine de calcul Ω est noté d , les vecteurs de $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ seront indiqués avec une flèche. Ainsi le vecteur position s'écrit \vec{x} . Les matrices sont soulignées deux fois.
- Les équations résolues (comme Navier-Stokes) sont écrites sous forme de système à m équations. Les vecteurs contenant la solution du système appartiennent ainsi à \mathbb{R}^m et seront marqués en gras. On prend l'exemple du vecteur contenant les variables conservatives : \mathbf{U} . Les matrices correspondantes seront notées comme les vecteurs et soulignées.
- Une fois la notion de discrétisation introduite, de nouveaux objets apparaissent. Les vecteurs contenant toutes les valeurs de la solution aux N_h noeuds du maillage sont écrits entre accolades. Pour la résolution d'une équation seule, ces vecteurs appartiennent à \mathbb{R}^{N_h} . Lorsqu'il s'agit d'un système, les vecteurs sont dans $\mathbb{R}^{m \times N_h}$. Les matrices correspondantes appartiennent soit à $\mathcal{M}_{N_h}(\mathbb{R})$, soit à

$\mathcal{M}_{m \times N_h}(\mathbb{R})$ pour un système. On les note entre crochets. La matrice de masse s'écrit par exemple : $[\mathcal{M}]$.

Indices - Exposants

Plusieurs types d'indices ou d'exposants peuvent apparaître dans les définitions des méthodes qu'on décrit dans ce chapitre. D'une manière générale, les indices sont liés à la discrétisation spatiale et les exposants à la discrétisation temporelle. Il arrive néanmoins qu'un exposant soit utilisé pour indiquer un numéro de cellule.

Il y a, en outre, plusieurs types de sommations : globales (sur l'ensemble des éléments ou des noeuds) ou locales (sur les sommets d'une cellule).

- Lorsqu'on travaille avec les éléments ou cellules, ceux-ci seront désignés par l'indice e avec $e \in \{1, \dots, N_K\}$. Une somme sur l'ensemble des cellules du maillage sera notée de façon synthétique : $\sum_{e \in \mathcal{T}_h}$ signifiant en réalité : $\sum_{e|K_e \in \mathcal{T}_h}$.
- Pour la numérotation locale des sommets d'une cellule, on utilisera les indices k ou l avec $k, l \in \{1, \dots, n_v^e\}$. La sommation sur les noeuds k d'une cellule sera donc notée : $\sum_{k \in K_e}$ avec pour signification $\sum_{k|k \in K_e}$.
- La sommation sur les faces notées avec l'indice f où $f \in \{1, \dots, N_f\}$, telle que les faces sont liées à un sommet k est écrite : $\sum_{f \ni k}$ et signifie : $\sum_{f|k \in f}$.
- Pour désigner la numérotation globale des noeuds, on utilisera l'indice j^1 . On a donc $j \in \{1, \dots, N_h\}$.
La sommation des contributions des cellules adjacentes à un noeud j (opération *scatter*, décrite section 4.3) s'écrit : $\sum_{e \in \mathcal{D}_j}$ et signifie : $\sum_{e|j \in K_e}$.
 $\mathcal{D}_j = \bigcup_{e|j \in K_e} K_e$ désigne l'ensemble des éléments contenant le noeud j .

4.3 Equations résolues et calcul des métriques

4.3.1 Equations sous forme compacte

Comme on l'a évoqué dans la partie I, la formulation différentielle des équations de Navier-Stokes, des équations décrivant la phase dispersée ou encore des équations de convection-diffusion d'un scalaire avec ou sans terme source, s'écrit de manière compacte de la façon suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} = \mathbf{S} \quad (4.5)$$

où $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^m$ est le vecteur contenant les m variables conservatives (4 ou 5 pour les équations de Navier-Stokes, pour Ω respectivement dans \mathbb{R}^2 ou \mathbb{R}^3), $\vec{\mathcal{F}} = (\mathbf{F}, \mathbf{G}, \mathbf{H})^T$ le tenseur des flux de \mathbf{U} et $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^m$ représente les termes sources. Les différentes variables et leurs flux ont été présentés dans la

¹Il faut noter toutefois que l'indice k est aussi utilisé pour la numérotation globale lors de la description de la méthode de Galerkin.

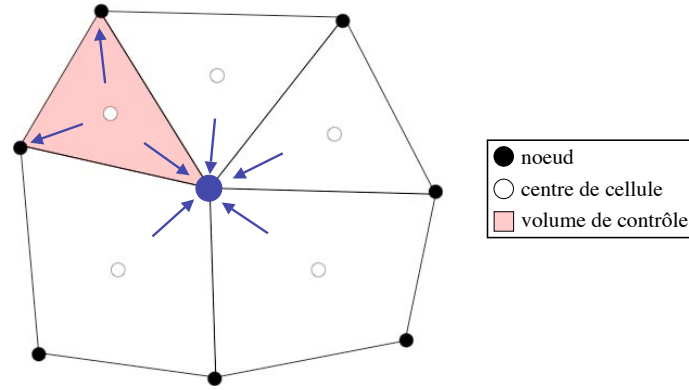


FIG. 4.4 - Représentation d'un maillage hybride et mise en évidence : (1) des contributions d'un élément (coloré ici) vers ses sommets et (2) des contributions des cellules adjacentes à un noeud (ici le noeud au centre du schéma).

partie I de cette thèse. Les flux peuvent être explicités selon deux composantes :

$$\vec{\mathcal{F}} = \vec{\mathcal{F}}^C(\mathbf{U}) + \vec{\mathcal{F}}^V(\mathbf{U}, \vec{\nabla}\mathbf{U}) \quad (4.6)$$

$\vec{\mathcal{F}}^C$ correspond aux flux convectifs, propres aux équations d'Euler (et ne dépendent que de \mathbf{U}) et $\vec{\mathcal{F}}^V$ sont les flux visqueux (dépendant à la fois de \mathbf{U} et de ses gradients).

4.3.2 Discrétisation du domaine de calcul

La première étape de la formulation *cell-vertex* est commune aux méthodes volumes ou éléments finis et consiste à discrétiser, comme on l'a dit dans la section 4.1, le domaine de calcul en un ensemble conforme de polyèdres. Ici, chaque polyèdre (ou *cellule*, *maille* ou encore *élément*) est composé de n_v^e sommets (*vertex-vertices* en anglais) qui constituent les N_h noeuds du maillage. Le principe de résolution de la méthode *cell-vertex* est d'appliquer les bilans des flux des lois de conservation dans les *cellules* primales (ou *éléments* ou *mailles*) du maillage, puis de *redistribuer* aux noeuds pour écrire la mise à jour temporelle des variables conservatives (voir figure (4.4)). Dans cette formulation, le stockage des variables ne se fait pas au centre des volumes de contrôle sur lesquels sont appliqués les bilans, mais aux noeuds (donc aux sommets des éléments).

La résolution de l'équation (4.5) se fait à chaque noeud de discrétisation du maillage et en plusieurs étapes. La première est de réaliser le calcul du résidu (ou *fluctuation*) pour chaque élément K_e . Celui-ci est défini de la manière suivante [?] :

$$\mathbf{R}_e := \frac{1}{V_e} \int_{K_e} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h d\mathcal{V} \quad (4.7)$$

En appliquant le théorème de Green-Gauss à l'équation (4.7)

$$\mathbf{R}_e := \frac{1}{V_e} \oint_{\partial K_e} \vec{\mathcal{F}}_h \cdot \vec{n} dS \quad (4.8)$$

où $\vec{\mathcal{F}}_h$ est l'approximation numérique du flux $\vec{\mathcal{F}}$ et $V_e := \text{mes}(K_e)$ est le volume de la cellule K_e (en 2 dimensions, il s'agit de l'aire).

4.3.3 Métriques

Avant de donner les détails du calcul du résidu, on va rappeler comment sont définies les métriques dans AVBP. Le code de calcul peut être utilisé sur des maillages hybrides (voir figure (4.4)), on peut donc combiner des éléments typiques des maillages structurés (quadrilatères, hexaèdres) et des maillages non-structurés (triangles, tétraèdres), ainsi que des éléments de transition (prismes, pyramides), comme on le voit sur la figure (4.5). La méthode *cell-vertex* repose sur une définition des métriques basée aux cellules (par opposition à une méthode basée aux arêtes comme le code N3SNatur).

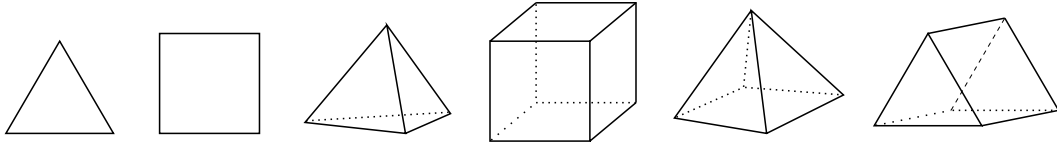


FIG. 4.5 - Les différents éléments pouvant se retrouver dans les maillages utilisés avec le code AVBP. De gauche à droite : triangle, quadrilatère, tétraèdre, hexaèdre, pyramide, prisme

A l'exception des bords du domaine Ω , où le traitement est particulier (on y reviendra plus tard), les normales utilisées dans AVBP sont définies aux sommets des éléments. Pour simplifier le codage et pouvoir appliquer la même formule de calcul du résidu ou des gradients, quel que soit le type d'élément considéré, on définit les normales de la manière suivante :

1. On calcule d'abord les normales \vec{S}_f aux faces f des cellules (pointant vers l'extérieur). Ce calcul inclut la pondération de la normale par l'aire de la face concernée. Il est à noter qu'en général, dans le cas des faces quadrangulaires, les 4 sommets n'appartiennent pas à un même plan. La face est donc divisée en quatre triangles (deux divisions selon les diagonales) et la normale \vec{S}_f est une moyenne des normales aux triangles (voir figure (1)). Cette manière de calculer les normales permet, en particulier, de préserver la linéarité d'une solution (ce qui revient à assurer une convergence du schéma à l'ordre 2 pour des maillages suffisamment réguliers).

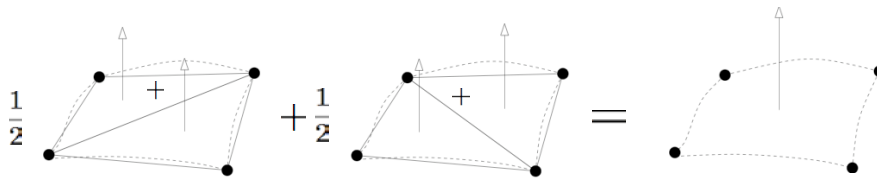


FIG. 4.6 - Calcul de la normale d'une face dont les sommets n'appartiennent pas tous au même plan.

2. La normale \vec{S}_k au sommet k est une combinaison linéaire des normales aux faces adjacentes à k et s'écrit :

$$\vec{S}_k = \sum_{f \ni k} -\frac{d}{n_v^f} \vec{S}_f \quad (4.9)$$

Le signe "-" apparaît car on a choisi une normale \vec{S}_k pointant vers l'intérieur de la cellule. n_v^f est le nombre de sommets sur la face f et d le nombre de dimensions de Ω . Il faut noter que la normale \vec{S}_k est pondérée par une surface (sa norme n'est pas unitaire). Un exemple pour un quadrilatère est donné sur la figure (4.7).

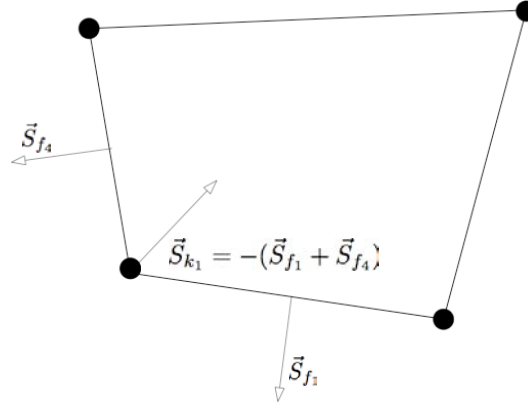


FIG. 4.7 - Calcul des normales aux noeuds dans un quadrilatère quelconque.

Par ailleurs, dans le cas d'éléments linéaires (triangles et tétraèdres), ce calcul revient à obtenir une normale \vec{S}_k égale à la normale de la face opposée au sommet k (figure (4.8)).

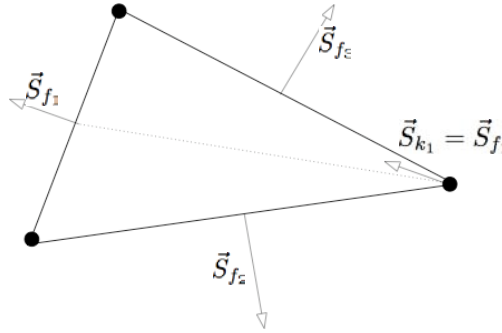


FIG. 4.8 - Calcul des normales aux noeuds dans un triangle quelconque.

Afin d'assurer la consistance des schémas numériques, on vérifie que : $\sum_{k \in K_e} \vec{S}_k = \vec{0}$.

4.3.4 Calcul du résidu et équations aux noeuds

La discrétisation du résidu utilise une intégration des flux suivant une méthode des trapèzes appliquée aux arêtes (ou aux faces selon la dimension), partant de l'hypothèse que les flux varient linéairement le

long des arêtes des éléments (voir section 4.1) [?, ?]. Grâce à la définition des normales (4.9), le résidu à la cellule K_e s'écrit alors, quel que soit le type d'élément considéré² :

$$\mathbf{R}_e = -\frac{1}{dV_e} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \vec{S}_k \quad (4.10)$$

où $\vec{\mathcal{F}}_k = \vec{\mathcal{F}}_h(\vec{x}_k) = \vec{\mathcal{F}}(\mathbf{U}_k)$ est l'approximation des flux au sommet $\{k | k \in K_e\}$. De plus, en notant que : $\vec{\nabla} \cdot \vec{x} = d$, on peut définir le volume V_e de la même manière par :

$$V_e = -\frac{1}{d^2} \sum_{k \in K_e} \vec{x}_k \cdot \vec{S}_k \quad (4.11)$$

Une fois les résidus aux cellules calculés, il est nécessaire d'envoyer l'information aux noeuds afin d'obtenir autant d'équations algébriques que d'inconnues et pouvoir réaliser la mise à jour du vecteur solution (figure (4.4)). Le résidu au noeud j s'écrit comme une moyenne des résidus aux cellules adjacentes pondérés par le volume de celles-ci :

$$\mathbf{N}_j = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \mathbf{D}_{j,e} V_e \mathbf{R}_e \quad (4.12)$$

où $\mathbf{D}_{j,e}$ est une matrice de distribution qui permet de distribuer le résidu du centre de la cellule K_e au noeud j . L'opération d'assemblage des contributions de chaque cellule est appelée *scatter*. Il s'agit de l'opération la plus coûteuse en terme de temps de calcul dans AVBP, car elle fait intervenir des communications et transferts de données aux interfaces entre processeurs, en calcul parallèle, et entre groupe de cellules. Le volume de contrôle V_j associé au noeud j est défini : $V_j = \sum_{e \in \mathcal{D}_j} V_e / n_v^e$. On peut, dès lors, écrire un schéma semi-discret (avec un avancement en temps parfait) :

$$\frac{d\mathbf{U}_j}{dt} = -\mathbf{N}_j \quad (4.13)$$

On remarque que pour le moment, la discrétisation temporelle n'est pas évoquée. Cet aspect sera développé plus en détail dans la suite.

Il est à noter, ici, que pour assurer la *conservativité* du schéma numérique, la somme des matrices de distribution doit être égale à l'identité : $\sum_{k \in K_e} \mathbf{D}_{k,e} = \mathbf{Id}$ [?].

4.4 Les différents schémas de convection *cell-vertex*

Comme on l'a indiqué précédemment, on peut définir différents schémas de convection en fonction de la définition de la matrice $\mathbf{D}_{k,e}$. Cette section présente les différents schémas de convection disponibles dans AVBP. Ici on ne considère que $\vec{\mathcal{F}} = \vec{\mathcal{F}}^C$, la partie convective du flux.

²Le résidu s'écrit de la même façon que le terme spatial de l'équation (4.3). L'hypothèse que les flux varient linéairement le long des arêtes, la définition des normales (4.9) et une recombinaison des termes expliquent le signe "-" dans la formule (4.10) [?].

4.4.1 Différences centrées (DC ou CV)

Il s'agit du schéma numérique le plus simple que l'on puisse définir à partir de la formulation (4.12). En choisissant :

$$\mathbf{D}_{j,e}^{DC} = \frac{1}{n_v^e} \mathbf{Id} \quad (4.14)$$

Le résidu est donc distribué de manière équitable à chaque sommet de l'élément K_e . On montrera par la suite que sur des éléments $P1$, la formulation obtenue correspond à une méthode des éléments finis de Galerkin. Il correspond au schéma "classique" aux différences finies centrées du second ordre sur un maillage régulier mono-dimensionnel [?]. Dans le chapitre suivant, on montrera que ce schéma n'est pas dissipatif mais qu'il est, en revanche, très dispersif [?]. Par ailleurs, il faut noter qu'il est inconditionnellement instable lorsqu'il est associé à une méthode d'avancement explicite d'Euler (d'ordre 1). De ce fait, il est généralement utilisé avec une intégration temporelle Runge-Kutta du troisième ordre. Ce schéma a été très souvent employé, par le passé, dans des applications aérodynamiques stationnaires (y compris sous ses formes *cell-centre* [?] et *vertex-centred* [?]), du fait de sa précision sur maillages assez réguliers et sa simplicité de codage. Il nécessite, cependant, l'ajout quasi-systématique de viscosité artificielle pour assurer sa stabilité dans les cas non-linéaires [?].

4.4.2 Lax-Wendroff (LW)

Ce schéma numérique a été introduit par R-H.Ni [?] puis développé par Hall [?]. Il s'agit de l'adaptation du schéma Lax-Wendroff [?, ?] à la méthode *cell-vertex* [?, ?, ?]. Le schéma LW est, en réalité, un schéma de discrétisation totale puisqu'il combine discrétisations temporelles et spatiales. Le but est de stabiliser le schéma aux différences centrées, associé à une intégration temporelle d'Euler (schéma FTCS pour *forward in time, centred in space*), en introduisant un terme diffusif permettant de supprimer le premier terme de l'erreur de troncature du schéma FTCS, responsable de l'anti-diffusion (et *a fortiori* l'instabilité) et dû à l'intégration temporelle. Cette méthodologie est applicable, non seulement, pour les différences finies mais aussi pour la méthode *cell-vertex* ou les éléments finis.

Le principe de départ est un développement en série de Taylor à l'ordre 3 en temps du m-vecteur solution :

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} = \left. \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right|^n + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} \right|^n \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2), \quad (4.15)$$

avec Δt le pas de temps. La méthodologie de Lax et Wendroff consiste à utiliser l'équation (4.5) pour exprimer les dérivées temporelles et à les remplacer par des dérivées spatiales. Ainsi on a :

$$\left. \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right|^n = - \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}} \right)^n \quad (4.16)$$

et pour la dérivée d'ordre 2 :

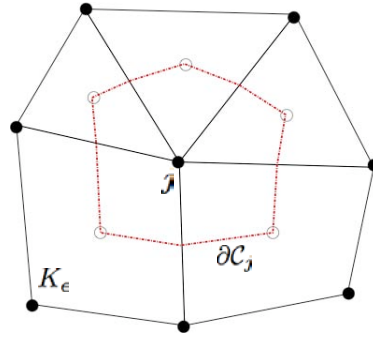


FIG. 4.9 - Volume de contrôle associé au noeud j . $\partial\mathcal{C}_j$ correspond au chemin d'intégration pour la dérivée spatiale d'ordre 2 apparaissant dans le schéma LW.

$$\left. \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} \right|^n = -\frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}})^n \quad (4.17)$$

$$= -\vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial \vec{\mathcal{F}}}{\partial t} \right)^n \quad (4.18)$$

$$= \vec{\nabla} \cdot (\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}})^n \quad (4.19)$$

L'équation (4.15) s'écrit donc :

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} = -(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}})^n + \frac{1}{2} \vec{\nabla} \cdot (\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}})^n \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (4.20)$$

Afin de la discrétiser spatialement, l'équation (4.20) est intégrée sur le volume de contrôle associé au noeud j (figure (4.9)), noté \mathcal{C}_j^3 , ce qui donne⁴ :

$$\frac{\mathbf{U}_j^{n+1} - \mathbf{U}_j^n}{\Delta t} = -\frac{1}{V_j} \int_{\mathcal{C}_j} (\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}})^n d\mathcal{V} + \frac{\Delta t}{2V_j} \int_{\mathcal{C}_j} \vec{\nabla} \cdot (\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}})^n d\mathcal{V} \quad (4.21)$$

$$= -\frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{1}{n_v^e} V_e \mathbf{R}_e^n + \frac{\Delta t}{2V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \int_{\partial(\mathcal{C}_j \cap K_e)} (\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}})^n \cdot \vec{n} d\mathcal{S} \quad (4.22)$$

$$= -\frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{1}{n_v^e} V_e \mathbf{R}_e^n + \frac{\Delta t}{2dV_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} (\vec{\mathcal{A}}_e \mathbf{R}_e)^n \cdot \vec{S}_{j,e} \quad (4.23)$$

où $\vec{\mathcal{A}}_e = (\bar{\mathbf{A}}_e, \bar{\mathbf{B}}_e, \bar{\mathbf{C}}_e)^T$ et $\bar{\mathbf{A}}_e, \bar{\mathbf{B}}_e$ et $\bar{\mathbf{C}}_e$ sont les matrices jacobienues des flux convectifs dans $\mathcal{M}_m(\mathbb{R})$,

³Le volume \mathcal{C}_j correspond au volume de contrôle utilisé dans une méthode *vertex-centred*. Néanmoins, ici, les métriques de ce volume ne sont pas définies explicitement, ce qui permet d'économiser du temps de calcul et de la mémoire.

⁴Il existe une autre interprétation du volume de contrôle du chemin d'intégration pour le terme dissipatif et pour un quadrilatère : Morton [?], en faisant un lien avec la méthode Taylor-Galerkin, propose d'utiliser la normale à la diagonale opposée au noeud j . Le résultat obtenu est, évidemment, le même.

moyennées au centre de la cellule K_e : $\bar{\underline{\mathbf{A}}}_e = \frac{1}{n_v^e} \sum_{k|k \in K_e} \underline{\mathbf{A}}_k$. On obtient finalement :

$$\underline{\mathbf{D}}_{j,e}^{LW} = \frac{1}{n_v^e} \underline{\mathbf{Id}} - \frac{\Delta t}{2dV_e} \vec{\mathcal{A}}_e^n \cdot \vec{S}_{j,e} \quad (4.24)$$

On reconnaît deux parties dans la matrice (4.24) : la première correspond aux différences centrées, la seconde a été obtenue en utilisant la méthodologie de Lax et Wendroff. Il s'agit du terme dissipatif et stabilisateur du schéma, évoqué précédemment. Celui-ci permet au schéma LW d'avoir certaines qualités indéniables. Il est **le seul** schéma totalement explicite à 2 niveaux du second ordre en espace **et** en temps avec un *stencil*⁵ aussi compact [?, ?], ce qui le rend, à la fois, précis et peu coûteux. Par ailleurs, le terme dissipatif lui assure une certaine robustesse, dans les cas non-linéaires (contrairement au schéma DC), ce qui est un atout indéniable.

4.5 Méthodes des résidus distribués et éléments finis

4.5.1 Introduction

La méthode *cell-vertex* présentée précédemment appartient (ou tout du moins est très proche) à une classe de schémas numériques appelés schémas à *résidus distribués* (ou *fluctuation splitting*, ou encore *schémas distributifs*) dont la formulation a des liens très clairs avec les méthodes *éléments finis* de Galerkin et de Petrov-Galerkin. Dans cette partie, on va, tout d'abord, présenter la méthode *fluctuation splitting* et montrer que le formalisme est très proche des schémas *cell-vertex*. Ensuite, on montrera que ces formulations peuvent être interprétées comme des schémas Petrov-Galerkin ou Galerkin⁶. Cela permettra de montrer les différences entre les approches présentées et introduire les raisons pour lesquelles les schémas Taylor-Galerkin ont été implantés dans AVBP. On ne cherchera pas à donner des détails mathématiques. Les lecteurs, cherchant une formulation plus rigoureuse d'un point de vue mathématique, se référeront à des ouvrages comme [?] ou [?] pour une présentation précise des éléments finis, et aux travaux d'Abgrall et collaborateurs [?, ?, ?, ?] pour la méthode *fluctuation splitting*.

Afin d'étudier les schémas sus-mentionnés, on s'appuiera principalement sur l'équation de convection linéaire à coefficients constants :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{c} \cdot \vec{\nabla} u = 0, \quad (4.25)$$

et donc le flux est égal à (\vec{c} étant constant) :

$$\vec{F} = \vec{c} u$$

On considère ici des éléments P1 et une vitesse de convection homogène. Il existe toutefois des formulations pour des éléments d'ordres supérieurs [?] et bilinéaires [?].

⁵Le *stencil* correspond au nombre de points ou de cellules qui sont impliqués dans la mise à jour de la solution à un noeud donné

⁶Les méthodes de Galerkin sont parfois appelées Bubnov-Galerkin, par opposition à Petrov-Galerkin.

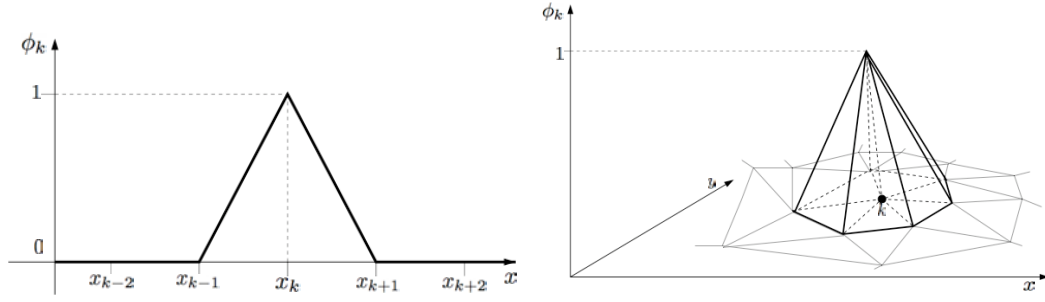


FIG. 4.10 - Gauche : Fonction chapeau pour un maillage monodimensionnel régulier ; Droite : Fonction chapeau sur un maillage bidimensionnel non structuré

4.5.2 Méthodes fluctuation splitting

Les méthodes *fluctuation splitting* tiennent leur origine dans le travail de Philip Roe [?] et sont une alternative aux schémas décentrés volumes finis classiques pour la discrétisation des équations hyperboliques. Dans le cas de l'étude de la convection linéaire, les formulations *cell-vertex* et *fluctuation splitting* sont équivalentes [?].

A la manière de la méthode des éléments finis, le domaine de calcul Ω est discrétisé en triangles (ou tétraèdres) (cf. équation (4.2)) et la solution est approximée de la manière suivante :

$$u_h(\vec{x}, t) = \sum_{k=1}^{N_h} U_k(t) \phi_k(\vec{x}) \quad (4.26)$$

où $\phi_k(\vec{x})$ sont les fonctions de forme associées à k . Dans les cas présents, il s'agit des classiques fonctions "chapeaux" ou "tentes", continues et linéaires par morceaux et définies par (figure (4.10)) :

$$\begin{cases} \phi_k(\vec{x}) = 1 \text{ si } \vec{x} = \vec{x}_k \\ \phi_k(\vec{x}) = 0 \text{ si } \vec{x} \neq \vec{x}_k \end{cases} \quad (4.27)$$

A l'instar de la méthode *cell-vertex*, on introduit le calcul d'un résidu. Ici il est appelé *fluctuation* par Roe et se calcule de la manière suivante pour l'équation (4.25) :

$$\Phi_e = \int_{K_e} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h d\mathcal{V} = \oint_{\partial K_e} \vec{\mathcal{F}} \cdot \vec{n} dS \quad (4.28)$$

$$= \oint_{\partial K_e} u_h \vec{c} \cdot \vec{n} dS \quad (4.29)$$

$$(4.30)$$

En introduisant la grandeur définie à un sommet l^7 :

$$k_l = -\frac{1}{d} \vec{c} \cdot \vec{S}_l$$

et en suivant la même méthode d'intégration (trapèzes) que pour l'équation (4.10.), on obtient :

$$\Phi_e = \sum_{l \in K_e} k_l U_l \quad (4.31)$$

Clairement, il apparaît que :

$$R_e V_e = \Phi_e \quad (4.32)$$

De la même manière pour les deux approches, les résidus sont distribués aux sommets des cellules à l'aide de coefficients (ou matrices) de distribution $D_{j,e}$. On notera qu'historiquement, les méthodes *cell-vertex* ont été développées, dans un premier temps, pour écrire des schémas centrés (présentés à la section 4.4) tandis que les schémas *fluctuation splitting*, mentionnés dans la littérature (N, LDA, PSI [?, ?, ?]), sont des schémas décentrés "amont". Toutefois, étant donné que les deux discrétisations sont identiques dans le cadre d'équations de convection linéaire⁸, tout schéma développé pour une méthode est valable pour l'autre.

4.5.3 Schémas décentrés

Lors de cette thèse, on présente brièvement les schémas codés dans AVBP. Il s'agit des trois schémas *fluctuation splitting* les plus répandus : N (pour *Narrow*), LDA (pour *Low Diffusion A*) et PSI (*Positive Streamwise Invariant*). On va rappeler, dans un premier temps, les principes de base de ces schémas pour le cas 2D. La généralisation aux cas 3D peut être trouvée dans la thèse de van der Weide [?], par exemple. La caractéristique des schémas amont distributifs (au même titre que le schéma SUPG [?]) est de traiter différemment les triangles pour lesquels l'écoulement entre par un ou deux côtés, afin de prendre en compte le sens de propagation des ondes. Dans le premier cas, seul le point situé le plus en aval reçoit le résidu (figure 4.11). Dans le second cas, il n'y a qu'un noeud en amont et deux en aval, ces deux derniers se partagent le résidu (figure 4.11). Dans les deux types de triangle, les sommets en amont ne sont donc pas modifiés (pour le triangle considéré) : c'est ce qui caractérise la propriété de décentrement amont ('*Upwinding*') de ces schémas numériques. On peut l'écrire aussi :

$$\text{Noeud(s) amont(s)} : k_l < 0 \text{ donc } D_{l,e} = 0$$

Comme l'explique Struijs [?], dans le cas 1 cible, le schéma qui consiste à envoyer le résidu au seul noeud aval est à la fois amont, positif (respect du principe du maximum), donc la solution reste bornée et préserve la linéarité (on rappelle que cela signifie qu'une solution *stationnaire* linéaire est préservée et que cette propriété est liée à une précision à l'ordre 2). Les schémas qu'on présente sont tous les trois identiques dans ce cas (il en va de même pour un tétraèdre à 1 cible). C'est donc pour le triangle à deux cibles que les approches diffèrent (par extension, pour les tétraèdres à 2 ou 3 cibles - voir [?]).

⁷A l'attention des habitués des méthodes *fluctuation splitting* : on garde ici les conventions (orientations des normales...) et les notations (indices...) choisies pour présenter l'approche *cell-vertex*.

⁸Il en est de même pour l'équation de Burgers non visqueuse $\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial u^2}{\partial x} = 0$, avec une linéarisation conservative.

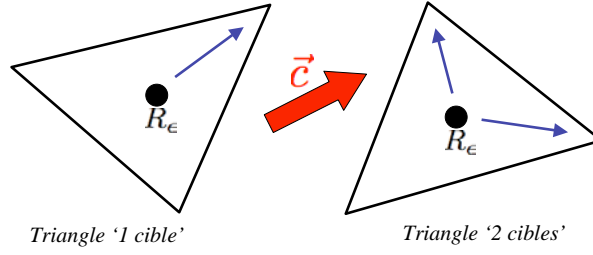


FIG. 4.11 - Deux cas typiques pour un triangle. Soit 1 sommet est en aval (à gauche) et il est le seul à recevoir le résidu, soit deux sommets sont en aval (à droite) et ils se partagent le résidu.

On introduit les notations suivantes qui seront utiles pour la définition des schémas amont qui suivent :

$$\begin{aligned} k_l^+ &= \max(0, k_l) \\ k_l^- &= \min(0, k_l) \\ U_{e,in} &= \frac{1}{\sum_{l \in K_e} k_l^-} \sum_{l \in K_e} k_l^- U_l \end{aligned}$$

et $U_{e,in}$ correspond à la valeur de u_h dans le triangle K_e au point d'entrée de l'écoulement⁹. Ces notations vont permettre de définir les contributions $\Phi_{j,e}$ aux résidus aux noeuds pour chaque schéma, quel que soit le type de triangle (ou de tétraèdre) considéré. On a de plus :

$$N_j = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} D_{j,e} V_e R_e = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \Phi_{j,e}$$

Schéma N

Son nom (*Narrow*) provient du fait qu'il s'agit du schéma ayant le plus petit stencil parmi les schémas amont linéaires¹⁰ [?]. Le résidu à un sommet j s'écrit :

$$\boxed{\Phi_{j,e}^N = k_j^+ (U_j - U_{e,in})} \quad (4.33)$$

Comme le montre van der Weide [?], on peut interpréter géométriquement ce schéma pour le triangle à 2 cibles de la manière suivante. Si on note 1 et 2 les deux points en aval, le vecteur vitesse \vec{c} est décomposé en deux parties $\vec{c} = \vec{c}_1 + \vec{c}_2$, suivant les directions des arêtes reliant le point 3 (amont) au point aval 1 ou 2. Les contributions aux points 1 et 2 correspondent alors aux résidus construits avec \vec{c}_1 et \vec{c}_2 au lieu \vec{c} (voir figure 4.12). Si on somme les 2 contributions, on retrouve bien le résidu R_e :

⁹Ce point d'entrée correspond au seul point amont pour le triangle à 2 cibles et à la projection suivant la direction de \vec{c} du seul point aval sur l'arête où l'écoulement entre dans le cas à 1 cible.

¹⁰Un schéma est dit linéaire si les coefficients pour le définir ne dépendent pas de la solution

$$\begin{aligned}
 \Phi_{1,e} + \Phi_{2,e} &= R_e(\vec{c}_1)V_e + R_e(\vec{c}_2)V_e \\
 &= \oint_{\partial K_e} u_h \vec{c}_1 \cdot \vec{n} dS + \oint_{\partial K_e} u_h \vec{c}_2 \cdot \vec{n} dS \\
 &= \oint_{\partial K_e} u_h \vec{c} \cdot \vec{n} dS \\
 &= R_e V_e
 \end{aligned}$$

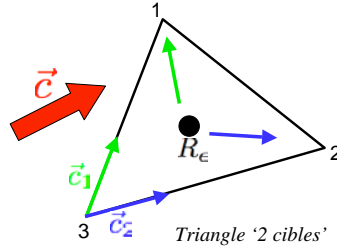


FIG. 4.12 - Schéma N pour un triangle à 2 cibles. Le vecteur vitesse se décompose en deux composantes \vec{c}_1 et \vec{c}_2 qui permettent de construire les contributions aux sommets en aval.

Le schéma N est amont et positif [?, ?, ?]. Comme les coefficients $R_{j,e}/N_j$ se sont pas bornés quand R_e tend vers zéro, le schéma N ne préserve pas la linéarité et ne peut pas être interprété comme un schéma de type Petrov-Galerkin [?, ?].

Schéma LDA

Le coefficient de distribution du schéma LDA est le suivant [?] :

$$D_{j,e}^{LDA} = \frac{k_j^+}{\sum_{l \in K_e} k_l^+} \quad (4.34)$$

Le schéma LDA peut aussi être interprété géométriquement pour un triangle à 2 cibles. Il partage le résidu R_e entre les deux triangles définis par le point amont, un point aval et le point de sortie P_{out} , qui correspond à la projection suivant la direction \vec{c} du point amont sur l'arête d'où sort l'écoulement. La pondération pour le partage du résidu est fonction de l'aire des triangles [?] (voir figure 4.13).

Le schéma obtenu est amont et préserve la linéarité, la précision est donc accrue par rapport au schéma N. En revanche, la positivité est perdue dans l'opération car le schéma est linéaire (cf. théorème de Godunov).

Schéma PSI

Ce schéma a été introduit par Struijs [?] pendant sa thèse. Il possède toutes les propriétés intéressantes des schémas N et LDA. En effet, il est amont, positif et préserve la linéarité (PSI est non linéaire). Le

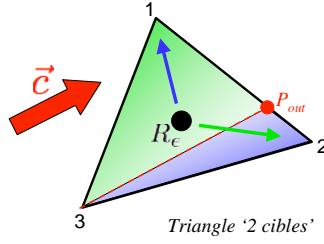


FIG. 4.13 - Schéma LDA pour un triangle à 2 cibles. Le résidu est partagé entre les points 1 et 2 en fonction de l'aire des triangles $12P_{out}$ et $13P_{out}$.

coefficient de distribution correspondant est le suivant :

$$D_{j,e}^{PSI} = \frac{\max(0, D_{j,e}^N)}{\sum_{l \in K_e} \max(0, D_{l,e}^N)} \quad (4.35)$$

où $D_{j,e}^N = \frac{\Phi_{j,e}^N}{Re V_e}$. En outre, Sidilkover et Roe [?] ont montré, par la suite, que le schéma PSI peut être interprété comme un schéma N limité (par le limiteur minmod).

Remarques

- On peut écrire aussi le schéma LW dans ce formalisme. Pour le différencier du schéma précédemment présenté (Eq.(4.24)), on l'appellera schéma LW-scalaire. On a alors :

$$D_{j,e}^{LW_s} = \frac{1}{d+1} + \frac{\Delta t}{2V_e} k_j \quad (4.36)$$

Pour la convection linéaire, on notera que les équations (4.24) et (4.36) sont équivalentes. Le premier terme de $D_{j,e}^{LW_s}$ correspond au coefficient de distribution qu'on obtient en appliquant la méthode de Galerkin (différences centrées) et le deuxième est la contribution LW.

- Tous ces schémas sont construits, à la base, pour des problèmes stationnaires. Néanmoins, on peut les utiliser avec une intégration temporelle de type Euler (ce qu'on fera pour les tester), ce qui réduit quelque peu leur précision.

4.5.4 Lien avec les éléments finis

Plusieurs auteurs ont mentionné le fait que les méthodes de distribution des résidus (donc la méthode *cell-vertex* dans le cas présent) peuvent être formulées comme une méthode Petrov-Galerkin (en général, pour les schémas décentrés) ou Galerkin (schéma classique aux différences centrées) [?, ?, ?]. Si on part de l'équation de convection (4.25), alors appliquer la méthode des résidus pondérés à l'équation (4.25) revient à résoudre le problème qui consiste à trouver u_h dans l'espace des solutions, telle que [?, ?, ?] :

$$\left\langle \frac{\partial u_h}{\partial t} + \vec{c} \cdot \vec{\nabla} u_h \middle| w_j \right\rangle = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial u_h}{\partial t} + \vec{c} \cdot \vec{\nabla} u_h \right) w_j dV = 0 \quad \forall j \in [1, N_h] \quad (4.37)$$

où w_j est une fonction poids (ou test) associée au noeud j .

Si $w_j = \phi_j$, on parle de méthode des éléments finis de Galerkin, si $w_j \neq \phi_j$ alors il s'agit d'une méthode de Petrov-Galerkin. Lorsque l'expression (4.26) est injectée dans (4.37), on obtient :

$$\int_{\Omega} \sum_{k=1}^{N_h} \frac{dU_k}{dt} \phi_k w_j d\mathcal{V} + \int_{\Omega} \sum_{k=1}^{N_h} U_k \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} = 0 \quad \forall j \in [1, N_h], \quad (4.38)$$

soit :

$$\sum_{e \in \mathcal{T}_h} \int_{K_e} \sum_{k=1}^{N_h} \frac{dU_k}{dt} \phi_k w_j d\mathcal{V} + \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \int_{K_e} \sum_{k=1}^{N_h} U_k \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} = 0 \quad \forall j \in [1, N_h], \quad (4.39)$$

qu'on peut réécrire, compte tenu de la compacité du support des ϕ_k , sous la forme :

$$\sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \frac{dU_k}{dt} \int_{K_e} \phi_k w_j d\mathcal{V} + \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} U_k \int_{K_e} \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} = 0 \quad \forall j \in [1, N_h]. \quad (4.40)$$

Ici, en isolant la partie spatiale (second terme) de (4.48), on peut faire apparaître le résidu R_e (ou la fluctuation Φ_e) en utilisant la relation classique liant le gradient de la fonction de forme liée au sommet k avec la normale à la face opposée à k (pour des éléments P1) :

$$\boxed{\vec{\nabla} \phi_k = -\frac{\vec{S}_k}{dV_e}, \quad k \in K_e} \quad (4.41)$$

Le résidu apparaît alors :

$$\sum_{k \in K_e} \int_{K_e} U_k \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} = \left(\sum_{k \in K_e} U_k \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k \right) \int_{K_e} w_j d\mathcal{V} \quad (4.42)$$

$$= R_e \int_{K_e} w_j d\mathcal{V} \quad (4.43)$$

Lorsqu'on utilise la méthode de Galerkin, on a $\int_{K_e} w_j d\mathcal{V} = \int_{K_e} \phi_j d\mathcal{V} = V_e/n_v^e$. Ainsi, on retrouve le terme $R_e V_e/n_v^e$ de l'équation (4.12) pour un schéma centré. De la même manière, si on utilise pour la fonction test w_j , la fonction caractéristique $\{\chi_j = 1 \quad \forall \vec{x} \in \mathcal{C}_j \text{ et } \chi_j = 0 \text{ sinon}\}$, on obtient le même résultat.

Selon la définition des fonctions tests que l'on utilise, on peut faire apparaître différents coefficients ou matrices de distributions et introduire, comme dans le cas des méthodes *fluctuation splitting*, un biais vers l'amont de l'écoulement pour construire les schémas décentrés, mentionnés section 4.5.2. C'est

ainsi que l'on peut obtenir un schéma SUPG (pour Streamwise Upwind Petrov-Galerkin) [?, ?] ou les schémas scalaires LDA et PSI présentés (section 4.5.3) [?, ?, ?] en écrivant [?, ?] :

$$w_j = \phi_j + \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \left(D_{j,e} - \frac{1}{d+1} \right) \chi_j \quad (4.44)$$

où $D_{j,e}$ correspond au coefficient de distribution du schéma choisi.

On peut reformuler l'équation (4.39) de manière plus compacte :

$$\sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \mathcal{M}_{jk}^e \frac{dU_k}{dt} + \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \mathcal{K}_{jk}^e U_k = 0 \quad \forall j \in [1, N_h]. \quad (4.45)$$

avec :

$$\mathcal{M}_{jk}^e = \int_{K_e} \phi_k w_j d\mathcal{V} \quad (4.46)$$

$$\mathcal{K}_{jk}^e = \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} \quad (4.47)$$

où \mathcal{M}_{jk}^e permet de construire la matrice de masse et \mathcal{K}_{jk}^e une matrice de rigidité. Du fait de la compacité du support sur lequel ϕ_k et w_j sont non-nulles, les matrices sus-nommées sont creuses et leurs éléments sont nuls pour tout k n'appartenant pas à un proche voisinage de j (c'est-à-dire j lui-même et les noeuds appartenant aux cellules adjacentes à j). Sous forme matricielle, on obtient :

$$[\mathcal{M}] \frac{d\{U\}}{dt} + [\mathcal{K}] \{U\} = 0 \quad (4.48)$$

avec :

$$\mathcal{M}_{jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \mathcal{M}_{jk}^e \quad (4.49)$$

$$\mathcal{K}_{jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \mathcal{K}_{jk}^e \quad (4.50)$$

4.5.5 Matrice de masse et intégration temporelle

L'apparition de la matrice de masse a un défaut majeur : le schéma numérique obtenu est *implicite* en espace, ce qui implique une inversion de matrice. En pratique, une première approximation de taille est réalisée concernant la partie temporelle (premier terme dans (4.39)) et permet d'obtenir un schéma totalement *explicite*. Si on revient aux schémas *cell-vertex* ou *fluctuation splitting*, précédemment cités et appliqués à l'équation (4.25), l'intégration spatiale du terme temporel s'écrit simplement :

$$\int_{\Omega} \frac{dU_h}{dt} w_j d\mathcal{V} = \frac{dU_j}{dt} V_j \quad \forall j \in [1, N_h] \quad (4.51)$$

Cela revient, physiquement, à supposer que la dérivée temporelle est constante au sein du volume V_j , ce qui est une hypothèse assez forte et limite la précision du schéma. Mathématiquement, cela se traduit par la condensation de la matrice de masse $\{\mathcal{M}\}$ (*lumped mass matrix*)[?] et on écrit :

$$\mathcal{M}_{jj}^{lumped} = \sum_{k=1}^{N_h} \mathcal{M}_{jk} = V_j \quad (4.52)$$

$$\mathcal{M}_{jk}^{lumped} = 0 \quad \forall k \neq j \quad (4.53)$$

Lorsque tous ces schémas ont été développés, le but était de simuler des écoulements stationnaires [?, ?]. L'approximation (4.51) n'était alors pas considérée comme étant problématique, vu l'absence d'intérêt de la dérivée temporelle (qui est nulle quand l'état stationnaire est atteint). En revanche, dans le cadre de la simulation des écoulements instationnaires, un calcul plus exact peut s'avérer très avantageux voire nécessaire, malgré un coût supplémentaire. Certains schémas *upwind fluctuation splitting*, comme le schéma LDA, préservent la linéarité de la solution, ce qui assure une convergence d'ordre 2 pour un calcul stationnaire. Le passage en instationnaire, avec une matrice condensée, lui fait irrémédiablement perdre un ordre de précision. Pour les schémas centrés (DC ou LW), le résultat est moins dramatique. L'ordre de convergence de 2 est préservé grâce au stencil symétrique [?], mais il suffit de rappeler que, sur un maillage régulier mono-dimensionnel, la méthode de Galerkin avec des éléments P1 permet une convergence à l'ordre 4 (avec une dérivation temporelle parfaite néanmoins !) alors qu'un schéma aux différences centrées (ce qui correspond au cas avec une matrice de masse condensée) n'est précis qu'à l'ordre 2 [?]. D'une manière générale, l'erreur de dispersion est bien plus faible, dès lors que la matrice de masse n'est pas condensée.

Une implantation de la méthode des éléments finis de Galerkin (avec inversion de la matrice de masse) est codée dans AVBP. Toutefois, en raison de performances moins intéressantes et un coût de calcul supérieur aux schémas Taylor-Galerkin (l'intégration temporelle est réalisée avec une méthode de Runge-Kutta à 3 étapes), le schéma Galerkin éléments finis est peu utilisé.

4.5.6 Cas des systèmes d'équations non linéaires

Approximation du produit et éléments finis de groupe

Ici, on va étudier le passage à un système de lois de conservation non linéaires. Tant que les flux s'expriment comme une combinaison linéaire des variables de \mathbf{U} , il n'y a pas d'incompatibilité entre la relation (4.26) et :

$$\vec{\mathcal{F}}_h(\vec{x}, t) = \sum_{k=1}^{N_h} \vec{\mathcal{F}}_k(t) \phi_k(\vec{x}) \quad (4.54)$$

Dans le cas de l'équation de convection linéaire (4.25), cette relation est consistante avec (4.26) car les flux sont effectivement linéaires en fonction de u .

En revanche, dès lors qu'on étudie des équations de convection non linéaires, cela n'est plus le cas. Supposer, à la fois, que la solution et les flux utilisent les mêmes fonctions d'interpolation est une hypothèse souvent réalisée, mais dont les effets peuvent s'avérer non négligeables. Rudgyard [?] et Crumpton et al [?] parlent alors d'une *approximation du produit des variables*.

Ce type d'approximation peut se rencontrer dans plusieurs cas, en voici deux exemples :

- La résolution des équations de Navier-Stokes stationnaires avec les méthodes *cell-vertex* [?] nécessitent l'utilisation de la relation (4.54) pour le calcul des termes de convection (comme on l'a vu dans la partie précédente) mais aussi l'équation (4.26) pour la construction des flux diffusifs (on verra pourquoi section 4.8).
- L'*approximation du produit des variables* est aussi souvent réalisée dans le cadre de la méthode des éléments finis, avec matrice de masse consistante, pour résoudre les équations d'Euler ou de Navier-Stokes.

Il reste à savoir dans quelle mesure considérer à la fois (4.26) et (4.54) dégrade la précision du résultat obtenu. Cette question est étudiée en détail par C.A.J Fletcher [?]. Il a étudié ce problème pour la discrétisation de différentes lois de conservation et a ainsi introduit la notion d'*éléments finis de groupe* (*group finite elements*), lorsque l'*approximation du produit des variables* est utilisée plutôt que la méthode conventionnelle des éléments finis. Il précise que deux étapes doivent être respectées pour parler de ce type de discrétisation :

- Les équations sont sous forme conservative,
- Un seul type d'interpolation est utilisé pour les termes apparaissant dans les termes différentiels des équations (\mathbf{U} et $\vec{\mathcal{F}}$ pour l'équation (4.5)).

On le verra dans la section 4.6, le développement des schémas éléments finis de Galerkin ou Taylor-Galerkin dans AVBP repose sur cette formulation d'*éléments finis de groupe*. Fletcher [?] montre que la formulation conventionnelle des éléments finis devient très coûteuse, lorsqu'utilisée avec des équations non-linéaires, et que l'approche *éléments finis de groupe* permet d'économiser du temps de calcul (beaucoup de produits de variables) et ce, de façon sensible (voir tableau 10.10, p 357 de [?]). Il montre, en outre, que ce gain ne s'accompagne pas d'une perte de précision sensible, l'ordre du schéma restant, en effet, le même. Dans un cas comme la résolution de l'équation de Burgers sans terme visqueux, il semble que les résultats obtenus soient même plus satisfaisants (moins d'oscillations près des discontinuités). Pour toutes ces raisons, Fletcher préconise l'utilisation des *éléments finis de groupe* pour la résolution de systèmes de lois de conservation non linéaires, comme les équations d'Euler.

Si on applique la méthode des résidus pondérés (de la même manière qu'au paragraphe 4.5.4) à l'équation (4.5), en utilisant en outre (4.26) (adaptée à \mathbf{U}) et (4.54), alors on a :

$$\sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \frac{d\mathbf{U}_k}{dt} \int_{K_e} \phi_k w_j d\mathcal{V} + \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} = 0 \quad \forall j \in [1, N_h]. \quad (4.55)$$

Sous forme matricielle (avec $\Omega \in \mathbb{R}^3$), on peut écrire :

$$[\mathcal{M}] \frac{d\{\mathbf{U}\}}{dt} + [\mathcal{K}_x]\{\mathbf{F}\} + [\mathcal{K}_y]\{\mathbf{G}\} + [\mathcal{K}_z]\{\mathbf{H}\} = 0 \quad (4.56)$$

$$\text{ou} \quad [\mathcal{M}] \frac{d\{\mathbf{U}\}}{dt} + [\vec{\mathcal{K}}] \cdot \{\vec{\mathcal{F}}\} = 0 \quad (4.57)$$

où :

$$\mathcal{K}_{x,jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \int_{K_e} \frac{\partial \phi_k}{\partial x} w_j d\mathcal{V} \quad \text{et} \quad \mathcal{K}_{y,jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \int_{K_e} \frac{\partial \phi_k}{\partial y} w_j d\mathcal{V} \quad (4.58)$$

$$\mathcal{K}_{z,jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \int_{K_e} \frac{\partial \phi_k}{\partial z} w_j d\mathcal{V} \quad \text{et} \quad \vec{\mathcal{K}}_{jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k w_j d\mathcal{V} \quad (4.59)$$

Là aussi, il faut noter que l'on peut faire apparaître le résidu *cell-vertex* (4.10) et l'équation nodale (4.12) en j dans l'équation (4.55) en utilisant la relation (4.41) et la méthode de Galerkin ($w_j = \phi_j, \forall j$) :

$$\sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k \phi_j d\mathcal{V} = \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k \phi_j d\mathcal{V} \quad (4.60)$$

$$= \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \sum_{k \in K_e} \left(\vec{\mathcal{F}}_k \cdot \vec{\nabla} \phi_k \int_{K_e} \phi_j d\mathcal{V} \right) \quad (4.61)$$

$$= \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{V_e}{n_v^e} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \vec{\nabla} \phi_k \quad (4.62)$$

$$= \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{V_e}{n_v^e} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \left(\frac{-\vec{S}_k}{dV_e} \right) \quad (4.63)$$

soit :

$$\boxed{\sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k \cdot \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k \phi_j d\mathcal{V} = \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{1}{n_v^e} \mathbf{R}_e V_e = \mathbf{N}_j V_j} \quad (4.64)$$

NB : on rappelle que ces développements ont été faits pour des éléments P1. On verra que le traitement des éléments bi- et trilinéaires est différent.

Variables de Roe

Il existe toutefois une élégante alternative qui a pour origine les travaux de Philip Roe et il s'agit de celle utilisée avec les techniques *fluctuation splitting*. Celle-ci consiste à discrétiser la formulation quasi-linéaire des équations de conservation écrites sous la forme (4.5) :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \vec{\mathcal{A}} \cdot \vec{\nabla} \mathbf{U} = \mathbf{0} \quad (4.65)$$

Le calcul du résidu fait alors intervenir les variables de Roe (notées \mathbf{Z} , voir [?] par exemple, pour leur expression). En effet, les variables conservatives \mathbf{U} et les flux convectifs $\vec{\mathcal{F}}^C$ s'expriment comme des relations bilinéaires en fonction de \mathbf{Z} . On a alors [?] :

$$\int_{K_e} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h d\mathcal{V} = \int_{K_e} \underbrace{\frac{\partial \vec{\mathcal{F}}}{\partial \mathbf{Z}}(\mathbf{Z}_h)}_{\text{linéaire en } \mathbf{Z}_h} \underbrace{\frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{U}}(\mathbf{Z}_h)}_{\text{linéaire en } \mathbf{Z}_h} \cdot \vec{\nabla} \mathbf{U}_h d\mathcal{V} \quad (4.66)$$

$$= \frac{\partial \vec{\mathcal{F}}}{\partial \mathbf{Z}}(\bar{\mathbf{Z}}_e) \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{U}}(\bar{\mathbf{Z}}_e) \cdot (\vec{\nabla} \mathbf{U}_h)_e V_e \quad (4.67)$$

$$= \vec{\mathcal{A}}(\bar{\mathbf{Z}}_e) \cdot (\vec{\nabla} \mathbf{U}_h)_e V_e \quad (4.68)$$

où $\bar{\mathbf{Z}}_e = \frac{1}{n_e} \sum_{k \in K_e} \mathbf{Z}_k$ est la moyenne de \mathbf{Z} dans l'élément K_e . La définition de \mathbf{Z} , celle de la moyenne $(\cdot)_e$ et l'hypothèse de linéarité de la solution (4.26) permettent aux relations de linéarisation (4.66)-(4.68) d'être conservatives, de satisfaire la propriété U [?, ?] et d'être exactes¹¹. Cette méthodologie a, tout de même, le désavantage d'être bien plus coûteuse que les éléments finis de groupe (matrices de passage à chaque noeud pour passer de \mathbf{U} à \mathbf{Z}).

4.6 Schémas de la famille Taylor-Galerkin

Dans le paragraphe 4.5.4, on a mis en évidence le fait que la méthode *cell-vertex* volumes finis peut être réinterprétée comme une méthode des éléments finis (de groupe) de Galerkin ou de Petrov-Galerkin avec condensation de la matrice de masse, **pour des éléments P1**. Ainsi, le passage aux éléments finis (en incluant la matrice de masse et son inversion) paraît une extension naturelle des schémas déjà codés dans AVBP. Ceci est un point de départ pour expliquer le développement des schémas Taylor-Galerkin. Les termes spatiaux étant déjà codés (cf. équations (4.42) et (4.43)), il reste encore la matrice de masse ainsi que son inversion à inclure. Dans cette section, on va tout d'abord présenter le schéma de base de cette famille : Euler-Taylor-Galerkin et rappeler la raison pour laquelle il n'est pas un candidat idéal pour la résolution d'un système d'équations non-linéaires. Cela permettra d'introduire les schémas Taylor-Galerkin à deux étapes, intégrés dans AVBP.

4.6.1 Euler-Taylor-Galerkin (ETG) pour la convection scalaire

Le premier schéma Taylor-Galerkin (TG) a été introduit à l'origine par Donéa [?], puis a été développé par Donéa et al. [?]. La méthode de Galerkin, comme on l'a démontré, permet d'obtenir des schémas de type différences centrées. L'ajout de la matrice de masse permet d'obtenir de bien meilleurs résultats grâce à une diminution sensible de l'erreur de dispersion. En revanche, elle a aussi tendance à diminuer le domaine de stabilité après une discrétisation temporelle standard (Euler, Leap-Frog, Crank-Nicolson¹²). Ces discrétisations temporelles, en outre, introduisent des erreurs qui compensent les avantages acquis grâce aux éléments finis.

Un des défauts majeurs des éléments finis de Galerkin, à l'instar des schémas centrés en différences

¹¹Le calcul des gradients est décrit paragraphe 4.8

¹²Nicolson vient de la mathématicienne Phyllis Nicolson (1917-1968). Or son nom est souvent écrit dans la littérature 'Nicholson'. L'orthographe exacte est sans 'h'.

finies, vient de leur incapacité à dissiper les *wiggles* dans les problèmes de convection(-diffusion) stationnaire. La conséquence a été le développement de schémas décentrés *amont*, à l'aide de la méthode de Petrov-Galerkin, afin d'introduire un biais vers l'amont (les fonctions tests étant construites en utilisant les gradients de vitesse, par exemple) et une diffusion plus fine (uniquement dans le sens de l'écoulement - *streamwise diffusion*) que les méthodes de viscosité artificielle scalaire (voir section 4.11). Ainsi ont été introduites les méthodes de stabilisation, telle que SUPG [?]. Celles-ci restent surtout avantageuses pour des cas de convection-diffusion stationnaire. Dans le cadre d'une convection instationnaire, en revanche, la diffusion est souvent jugée excessive [?].

Morton et Parrott [?] ont donc développé des schémas Petrov-Galerkin centrés pour discrétiser l'équation de convection linéaire monodimensionnelle, dont les fonctions tests sont choisies afin d'annuler le terme principal de l'erreur de troncature temporelle. Les résultats obtenus sont très encourageants et nettement supérieurs à ceux fournis par les discrétisations en différences finies équivalentes. Leur généralisation, pour les cas non-linéaires et multidimensionnels, est toutefois complexe.

Sur ces idées, Jean Donéa [?] a introduit la classe des schémas Taylor-Galerkin. Il présente ainsi les schémas Euler-Taylor-Galerkin (ETG, appelé aussi parfois Lax-Wendroff-Taylor-Galerkin [?, ?]), Crank-Nicolson-Taylor-Galerkin (CNTG) et Leap-Frog-Taylor-Galerkin (LFTG). Ils sont la combinaison de la méthode Taylor-Galerkin qu'on va présenter avec les intégrations temporelles Euler, Crank-Nicolson et Leap-Frog. On ne va décrire que le schéma ETG. En effet, les deux autres, bien que plus précis (ordre 4 en espace et en temps) présentent respectivement deux désavantages très conséquents : le premier est implicite en temps, le second est un schéma à 3 niveaux (donc un coût mémoire conséquent). De nombreuses recherches ont été réalisées depuis sur les schémas Taylor-Galerkin, y compris dans des domaines autres que la mécanique des fluides. On citera parmi les équipes très actives, celle de A.J. Baker [?] qui a généralisé les idées de Donéa et a introduit le concept de *Taylor Weak Statement* (TWS) intégrant les schémas SUPG, GALS (*Galerkin Least Squares* [?]) et TG.

L'idée de base reprend celle de Lax et Wendroff [?] et repose sur trois étapes :

- La solution au temps $t = t^{n+1}$ est exprimée sous la forme d'une série de Taylor en temps, à partir de la solution $t = t^n$. Comme il faut garder à l'esprit que les avantages apportés par les éléments finis (en terme de précision) peuvent être annulés par une discrétisation temporelle d'ordre faible, la série de Taylor est réalisée jusqu'à l'ordre 4 (3 pour LW). Après reformulation pour faire apparaître une intégration temporelle de type Euler, on a :

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|^n + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|^n \Delta t + \frac{1}{6} \left. \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right|^n \Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (4.69)$$

- Les dérivées temporelles sont remplacées par des dérivées spatiales équivalentes, à l'aide de l'équation à résoudre (4.25). Les deux premières dérivées sont exprimées comme pour le schéma LW (voir équations (4.16) et (4.19) avec $\vec{\mathcal{F}} = c u \vec{e}_x$ et $\vec{\mathcal{A}} = c \vec{e}_x$). La dérivée troisième est, quant à elle, remplacée de manière différente :

$$\left. \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right|^n = \frac{\partial}{\partial t} \left(\left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|^n \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\vec{c} \cdot \vec{\nabla} (\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u) \right) = \frac{1}{\Delta t} \vec{c} \cdot \vec{\nabla} \left(\vec{c} \cdot (\vec{\nabla} u^{n+1} - \vec{\nabla} u^n) \right) \quad (4.70)$$

Cette "astuce" de Donéa évite de faire apparaître une dérivée troisième et laisse donc la possibilité d'utiliser tous les éléments, y compris ceux dont les fonctions de forme sont linéaires le long des arêtes (éléments P1, Q1...). Il faut bien noter que, sans cela, l'intérêt de coder les schémas Taylor-Galerkin aurait été grandement diminué, puisque les maillages utilisés dans AVBP n'emploient que des éléments de ce type !

- Une fois les deux premières opérations réalisées, l'équation (4.69) devient une équation composée uniquement de dérivées spatiales :

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{6} \vec{c} \cdot \vec{\nabla}(\vec{c} \cdot \vec{\nabla})\right) (u^{n+1} - u^n) = -\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u^n + \frac{\Delta t}{2} \vec{c} \cdot \vec{\nabla}(\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u^n) \quad (4.71)$$

Les dérivées spatiales sont alors discrétisées à l'aide de la méthode des éléments finis de Galerkin, comme elle est décrite paragraphe 4.5.4. Ce qui permet d'obtenir l'équation :

$$\left([\mathcal{M}] - \frac{\Delta t^2}{6} [\mathcal{L}]\right) (\{U^{n+1}\} - \{U^n\}) = -\Delta t [\mathcal{K}] \{U^n\} + \frac{\Delta t^2}{2} [\mathcal{L}] \{U^n\} \quad (4.72)$$

où les matrices $[\mathcal{M}]$ et $[\mathcal{K}]$ sont les opérateurs de masse et de rigidité déjà décrits paragraphe 4.5.4. L'opérateur $[\mathcal{L}]$ est une matrice de rigidité relative à la dérivée spatiale d'ordre 2. Sa construction est la suivante :

$$[\mathcal{L}] \{U\}_j = \left\langle \vec{c} \cdot \vec{\nabla}(\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u_h^n) \middle| \phi_j \right\rangle \quad (4.73)$$

$$= \vec{c} \cdot \int_{\Omega} \vec{\nabla}(\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u_h^n) \phi_j d\mathcal{V} \quad (4.74)$$

$$= \vec{c} \cdot \oint_{\partial\Omega} (\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u_h^n) \phi_j \vec{n} d\mathcal{S} - \int_{\Omega} (\vec{c} \cdot \vec{\nabla} u_h^n) \vec{\nabla} \phi_j d\mathcal{V} \quad (\text{IPP}) \quad (4.75)$$

Et (IPP) signifie intégration par parties. Cette étape primordiale permet de faire disparaître la dérivée seconde et de n'avoir plus que des dérivées premières (ce qui permet d'utiliser éléments P1, Q1...). En introduisant la relation (4.26), on peut exprimer les composantes de $[\mathcal{L}]$ de la même manière que pour $[\mathcal{K}]$ et $[\mathcal{M}]$:

$$\mathcal{L}_{jk} = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \vec{c} \cdot \int_{\partial K_e \cap \partial\Omega} (\vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k) \phi_j \vec{n} d\mathcal{S} \quad (4.76)$$

$$- \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \vec{c} \cdot \int_{K_e} (\vec{c} \cdot \vec{\nabla} \phi_k) \vec{\nabla} \phi_j d\mathcal{V} \quad (4.77)$$

Le schéma numérique, ainsi obtenu, est identique au schéma nommé EPG(II) obtenu par Morton et Parrott [?]. Ceci montre un lien de parenté du schéma ETG avec la famille Petrov-Galerkin.

On le verra dans le chapitre suivant, le schéma ETG est précis à l'ordre 3 en espace et en temps. Comparé aux schémas LW ou au schéma centré du second ordre, l'erreur de dispersion qui lui est associée est beaucoup plus faible, ce qui le rend bien plus performant.

L'équation (4.72) reste assez simple, dans le cas présent, mais on note quelques défauts à ce schéma concernant le membre de gauche et la stabilité :

1. Dans le membre de gauche de (4.72), l'expression du terme $-\frac{\Delta t^2}{6} [\mathcal{L}]$ est beaucoup plus complexe dans les cas non-linéaires, faisant apparaître, entre autres, des dérivées temporelles de matrice jacobienne des flux [?] et de plus :
2. ce terme doit être recalculé à chaque itération : $[\mathcal{M}]$ est constante mais pas $-\frac{\Delta t^2}{6} [\mathcal{L}]$.
3. Le domaine de stabilité se réduit lorsque le problème devient multidimensionnel. Il est alors plus réduit que celui du schéma LW *cell-vertex* (en 2D ou 3D), bien que plus large que celui du schéma LW éléments finis [?].

Pour ces raisons, le schéma ETG n'est pas le meilleur candidat pour être adapté à la discrétisation des équations d'Euler. En revanche, il faut garder à l'esprit qu'il est très performant, tant qu'il s'agit de l'équation de convection d'un scalaire, car son coût reste raisonnable (une seule étape), compte tenu de l'amélioration sensible des résultats.

4.6.2 Famille des schémas *Two-Step Taylor Galerkin* (TTG) - Système d'équations de conservation

Présentation

Les défauts non négligeables du schéma ETG dans le cadre des équations d'Euler (sauf si on s'autorise une décomposition en ondes caractéristiques) ont poussé Selmin et Quartapelle [?, ?] à développer des schémas TG à deux étapes. Selmin [?] présente clairement le développement du schéma appelé alors LWTG-(2s) (2s pour *Two steps*) et des améliorations conséquentes qu'il apporte en comparaison de ETG. Colin et Rudgyard [?] ont écrit une formulation générale de cette famille de schémas lors de l'écriture des schémas TTGC. On va présenter ce développement. Il s'agit d'une formulation de type prédicteur-correcteur à six paramètres. Les trois étapes présentées section 4.6.1 sont toujours appliquées. La différence majeure vient de la partie 'développement de Taylor'. En effet, celui-ci est réalisé en deux étapes et s'écrit de la manière suivante :

$$\tilde{u}^n = u^n + \alpha \Delta t \frac{\partial u^n}{\partial t} + \beta \Delta t^2 \frac{\partial^2 u^n}{\partial t^2} \quad (4.78)$$

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\theta_1 \frac{\partial u^n}{\partial t} + \theta_2 \frac{\partial \tilde{u}^n}{\partial t} \right) + \Delta t^2 \left(\epsilon_1 \frac{\partial^2 u^n}{\partial t^2} + \epsilon_2 \frac{\partial^2 \tilde{u}^n}{\partial t^2} \right) \quad (4.79)$$

On voit, dès lors, que l'astuce introduite par Donéa pour exprimer la dérivée temporelle d'ordre 3 a disparu. En effet, celle-ci est à double tranchant. Certes, dans le cas de l'équation de convection linéaire, l'équation (4.70) permet l'utilisation des fonctions de forme linéaires, mais elle est aussi responsable de la présence du terme $-\frac{\Delta t^2}{6} [\mathcal{L}]$, si difficile à exprimer, dès que l'équation devient non linéaire.

Les schémas TTG sont précis au plus à l'ordre 4 en temps (et 3 en espace avec des fonctions de forme linéaires). Il convient ici de noter que Safjan et Oden [?] ont démontré qu'il est possible de généraliser et de construire des schémas à s étapes, précis à l'ordre $2s$ et inconditionnellement instables. Mais, pour ce faire, ils utilisent des éléments finis h - p , ce qui rend le problème particulièrement complexe et coûteux.

Le tableau 4.1 rappelle les valeurs des coefficients permettant de retrouver les schémas décrits dans la littérature. On précise ici que le choix du coefficient γ apparaissant dans le tableau 4.1 est le plus souvent fixé à $\gamma = 0.01$, comme préconisé par Colin et Rudgyard, pour réaliser des simulations aux grandes échelles. Des commentaires, quant à la performance des schémas TTG, seront faits au chapitre 5.

Là encore, ces schémas présentent une erreur de dispersion beaucoup plus faible que les schémas du second ordre. On le verra par la suite aussi, le fait d'utiliser deux étapes agrandit sensiblement la taille du domaine de stabilité du schéma, en particulier lorsque le problème est multi-dimensionnel.

Schémas	α	β	θ_1	θ_2	ϵ_1	ϵ_2
LW (1 étape)	0	0	1	0	1/2	0
TTG3	1/3	1/9	1	0	0	1/2
TTG4A	1/3	1/12	1	0	0	1/2
TTG4B	0.1409714	0.1160538	0	1	0	0.3590284
TTGC(γ)	1/2 - γ	1/6	0	1	γ	0

TAB. 4.1 - Famille des schémas TTG et les différents coefficients à utiliser pour les obtenir

Ecriture pour les équations d'Euler

On ne présente pas l'écriture de ces schémas pour l'équation de convection linéaire. En effet, celle-ci reste extrêmement proche de ce qui a été présenté dans les sections 4.5.4 et 4.6.1.

La dérivation temporelle étant réalisée, il faut appliquer la deuxième étape de la méthode de Donéa, qui consiste à utiliser l'équation (4.5) pour remplacer les dérivées temporelles par des dérivées spatiales, ce qui donne [?] :

$$\tilde{\mathbf{U}}^n = \mathbf{U}^n - \alpha \Delta t \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^n + \beta \Delta t^2 \vec{\nabla} \cdot (\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^n) \quad (4.80)$$

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n - \Delta t \vec{\nabla} \cdot (\theta_1 \vec{\mathcal{F}}^n + \theta_2 \vec{\mathcal{F}}^n) + \Delta t^2 (\epsilon_1 \vec{\nabla} \cdot (\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^n) + \epsilon_2 \vec{\nabla} \cdot (\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^n)) \quad (4.81)$$

L'étape suivante consiste donc à appliquer la méthode de Galerkin aux équations (4.80)-(4.81) et on obtient ¹³ :

$$\int_{\Omega} \delta \tilde{\mathbf{U}}_h^n \phi_j \, d\mathcal{V} = -\alpha \Delta t \mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n) + \beta \Delta t^2 \mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) \quad (4.82)$$

$$\int_{\Omega} \delta \mathbf{U}_h^{n+1} \phi_j \, d\mathcal{V} = -\Delta t (\theta_1 \mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n) + \theta_2 \mathbf{L}_j(\tilde{\mathbf{U}}_h^n)) + \Delta t^2 (\epsilon_1 \mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) + \epsilon_2 \mathbf{LL}_j(\tilde{\mathbf{U}}_h^n)) \quad (4.83)$$

avec :

$$\delta \tilde{\mathbf{U}}_h^n = \tilde{\mathbf{U}}_h^n - \mathbf{U}_h^n \quad (4.84)$$

$$\delta \mathbf{U}_h^{n+1} = \mathbf{U}_h^{n+1} - \mathbf{U}_h^n \quad (4.85)$$

$$\mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n) = \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h^n \phi_j \, d\mathcal{V} \quad (4.86)$$

$$\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) = \oint_{\partial\Omega} \phi_j (\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h^n) \cdot \vec{n} \, dS - \int_{\Omega} (\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h^n) \cdot \vec{\nabla} \phi_j \, d\mathcal{V} \quad (4.87)$$

On rappelle que les deux termes de $\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n)$ sont obtenus suite à une intégration par parties (voir l'écriture du schéma TTG et l'équation (4.75))

¹³On reprend ici les notations utilisées dans [?] pour exprimer les opérateurs spatiaux.

Comme on l'a évoqué paragraphe 4.5.6, on va appliquer l'approche *éléments finis de groupe* de Fletcher (Colin et Rudgyard évoquent l'*approximation des produits des variables*), ce qui veut dire qu'on suppose à la fois (4.26) et (4.54). La méthodologie reste la même que dans les paragraphes précédents, donc on obtient directement :

$$\mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n) = \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k^n \cdot \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_k \phi_j d\mathcal{V} \quad (4.88)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) &= \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \vec{\mathcal{A}}_e^n \cdot \sum_{k \in K_e} \int_{\partial K_e \cap \partial \Omega} \left(\vec{\mathcal{F}}_k^n \cdot \vec{\nabla} \phi_k \right) \phi_j \vec{n} dS \\ &\quad - \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \vec{\mathcal{A}}_e^n \cdot \sum_{k \in K_e} \int_{K_e} \left(\vec{\mathcal{F}}_k^n \cdot \vec{\nabla} \phi_k \right) \vec{\nabla} \phi_j d\mathcal{V} \end{aligned} \quad (4.89)$$

Sous forme matricielle, on a finalement en utilisant les notations précédemment décrites (et $w_j = \phi_j$) :

$$[\mathcal{M}]\{\delta \tilde{\mathbf{U}}^n\} = -\alpha \Delta t \{\mathbf{L}(\mathbf{U}^n)\} + \beta \Delta^2 \{\mathbf{LL}(\tilde{\mathbf{U}}^n)\} \quad (4.90)$$

$$\begin{aligned} [\mathcal{M}]\{\delta \mathbf{U}^{n+1}\} &= -\Delta t \left(\theta_1 \{\mathbf{L}(\mathbf{U}^n)\} + \theta_2 \{\mathbf{L}(\tilde{\mathbf{U}}^n)\} \right) \\ &\quad + \Delta t^2 \left(\epsilon_1 \{\mathbf{LL}(\mathbf{U}^n)\} + \epsilon_2 \{\mathbf{LL}(\tilde{\mathbf{U}}^n)\} \right) \end{aligned} \quad (4.91)$$

Dans les équations (4.88) et (4.89), le choix de \mathcal{T}_h n'est pas encore arrêté. Les éléments K_e peuvent être linéaires, bilinéaires ou trilineaires. En plus de l'approche *éléments finis de groupe*, une hypothèse est réalisée pour le calcul de la matrice jacobienne. Comme pour le schéma LW *cell-vertex*, on la considère comme constante au sein de la cellule, ce qui a permis de sortir $\vec{\mathcal{A}}$ des intégrales et d'utiliser sa moyenne sur chaque élément.

Inversion de la matrice de masse

Une particularité des expressions (4.48), (4.72), (4.90) et (4.91), due à la méthode des éléments finis, est qu'elles sont implicites. Lorsque la matrice de masse n'est pas condensée, les schémas éléments finis sont implicites (en espace). La conséquence évidente est qu'il faut donc réaliser une inversion de la matrice $\{\mathcal{M}\}$. Le problème vient évidemment du fait qu'une telle opération est très coûteuse (en temps de calcul mais aussi en mémoire), si elle est faite de manière exacte. Mieux vaut donc avoir recours à une méthode itérative d'inversion. La matrice $\{\mathcal{M}\}$ étant définie positive et à diagonale dominante, on peut utiliser la méthode de Jacobi pour l'inverser (voir annexe B). Cependant, l'algorithme de Jacobi peut s'avérer très coûteux. Donéa [?] a néanmoins montré que deux itérations de la méthode suffisent pour obtenir un résultat, dont la qualité (en particulier d'un point de vue erreur de dispersion) reste très proche du schéma d'origine et dont la convergence en maillage reste la même (c'est-à-dire en $\mathcal{O}(h^3)$). Colin et Rudgyard [?] ont d'ailleurs confirmé ce résultat pour le schéma TTGC. Au final, on se retrouve donc avec des schémas très performants et dont le coût reste raisonnable (voir tableau (4.6.2)).

Schéma	Temps de calcul
<i>LW</i>	1
<i>TTG4A</i>	1,9
<i>TTGC(0.01)</i>	1,9
<i>GRK</i>	2,5

TAB. 4.2 - Temps de calcul avec différents schémas d'AVBP en prenant le schéma LW comme référence.

4.6.3 Implantation dans AVBP

Eléments linéaires

Dans le cas des éléments P1, l'écriture des schémas TTG dans AVBP est facilitée une fois que le schéma LW *cell-vertex* est lui-même codé, car les opérateurs utilisés sont les mêmes. Le cas du terme \mathbf{L}_j a déjà été évoqué paragraphe 4.5.6 et on a la relation (4.64), ce qui correspond au premier terme de (4.24).

Il reste à expliciter le terme \mathbf{LL}_j . On va considérer ici qu'on se trouve au centre du domaine. Le cas des termes sur le bord $\partial\Omega$ sera longuement discuté plus tard. Il reste donc :

$$\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) = - \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \vec{\mathcal{A}}_e^n \cdot \sum_{k \in K_e} \int_{K_e} (\vec{\mathcal{F}}_k^n \cdot \vec{\nabla} \phi_k) \vec{\nabla} \phi_j dV \quad (4.92)$$

$$= - \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \vec{\mathcal{A}}_e^n \cdot \int_{K_e} \vec{\nabla} \phi_j dV \left(\sum_{k \in K_e} \vec{\mathcal{F}}_k^n \cdot \vec{\nabla} \phi_k \right) \quad (4.93)$$

$$= \frac{1}{d} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} (\vec{\mathcal{A}}_e \mathbf{R}_e)^n \cdot \vec{S}_e \quad (4.94)$$

Eléments bi- et trinéaires / Maillages mobiles

Dans le cas des éléments non linéaires, il n'est plus possible de considérer les gradients des fonctions de forme comme étant constants sur chaque cellule. La relation (4.41) n'est donc plus valable et les calculs des vecteurs $\mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n)$ et $\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n)$ sont plus complexes. Théoriquement, on pourrait faire appel à des formules de quadratures classiques pour calculer les intégrales, mais cette alternative reste coûteuse et limite très fortement l'intérêt d'utiliser un maillage hybride. Pour pallier à ce problème de coût, Colin et Rudgyard [?] ont adopté une méthodologie originale qui consiste à calculer les intégrales comme dans le cas des éléments linéaires (en considérant les gradients et divergences des flux constants dans un élément), puis ajouter un terme de correction pour prendre en compte le caractère bi- ou trinéaire de l'élément. Le gain de temps de calcul est alors non négligeable, pour une perte de précision minimale. On a donc :

$$\mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n) = \mathbf{L}_j^{lin}(\mathbf{U}_h^n) + \delta \mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n) \quad (4.95)$$

$$\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) = \mathbf{LL}_j^{lin}(\mathbf{U}_h^n) + \delta \mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) \quad (4.96)$$

La description du calcul complet est donnée dans [?]. Sur des éléments réguliers, leur méthode permet d'obtenir une intégration exacte. D'après les tests réalisés dans [?], il semble, en effet, que la précision ne

soit pas fortement affectée lorsque le maillage devient quelconque. On notera, finalement, que la formulation approchée a été construite de façon à respecter la conservation discrète des grandeurs transportées. Enfin, bien qu'on n'ait pas utilisé cette spécificité dans cette thèse, il faut noter qu'il existe une version du schéma TTGC (ainsi que des schémas *cell-vertex* CV et LW) pour les maillages mobiles basée sur la formulation ALE (*Arbitrary Lagrangian-Eulerian*), développée et intégrée dans AVBP par Moureau et al [?].

4.7 Schémas de convection pour la partie diphasique

Les schémas de convection *cell-vertex* (différences centrées et LW) présentent de nombreuses qualités et, en particulier, leur robustesse face aux maillages irréguliers, hybrides et distordus. Néanmoins, si leur précision peut s'avérer suffisante pour des LES d'écoulements gazeux, principalement non réactifs, dans des géométries complexes [?, ?], certains calculs académiques ont montré leurs limites [?]. Les schémas TG implantés dans AVBP par Colin et Rudgyard peuvent être vus comme une extension du schéma LW, du fait du lien étroit qui existe entre éléments finis et méthode *cell-vertex* sur les éléments P1. Grâce à leur très faible erreur de dispersion, ces schémas fournissent de bien meilleurs résultats sur tous les cas tests classiques, comme on va le voir dans le chapitre suivant et ont montré leur réelle supériorité sur des configurations académiques [?] et sur des calculs réactifs monophasiques [?].

Comme on l'a mentionné précédemment, les équations permettant de décrire la phase dispersée sont d'une nature beaucoup plus "capricieuse" que les équations de Navier-Stokes. En effet, si le mouvement décorrélé est négligé, alors il n'y a ni terme de pression, ni terme diffusif. Dès lors, assurer la stabilité des calculs menés avec les schémas *cell-vertex* pour résoudre les deux phases, en particulier en géométrie complexe est une tâche très ardue et l'emploi de viscosité artificielle, qu'on décrit plus loin (section 4.11), est absolument indispensable [?, ?, ?] et parfois malheureusement insuffisant [?, ?]. Riber [?] a montré sur des THI que l'emploi des schémas TG avec un senseur de viscosité modifié permet de remédier, en grande partie, au problème, au moins sur des géométries simples. De ce fait, les calculs sur géométries complexes réalisés dans cette thèse, ainsi que d'autres calculs réalisés pendant la même période [?], sont tous basés sur cette stratégie. Toutefois, compte tenu de la nature hyperbolique des équations qu'on veut résoudre, des phénomènes rencontrés ("clusters" de particules assimilables à des chocs) [?, ?] et des choix faits par d'autres équipes résolvant des équations similaires (on pense, par exemple, à la méthode DQMOM [?]), le choix des schémas amont pourrait s'avérer payant à l'avenir, en terme de robustesse comme en précision, d'où l'intérêt porté dans cette thèse sur les schémas *fluctuation splitting*.

Ces derniers schémas ont été implantés et testés dans le code AVBP pour la convection d'un scalaire. Les résultats obtenus sont présentés dans le chapitre suivant. Compte tenu de l'absence d'inversion de la matrice de masse pour ces schémas, il n'est pas étonnant d'obtenir une précision d'ordre 1 et une diffusion numérique importante. Il faut, toutefois, noter que cette diffusion n'a lieu que dans le sens de propagation des ondes (contrairement à la viscosité artificielle qui agit dans toutes les directions). Ce point reste, néanmoins, à améliorer mais le potentiel de ces méthodes est indiscutable. L'ajout de la matrice de masse dans l'écriture des schémas distributifs permettrait une amélioration considérable de leur précision des schémas [?] mais au dépend de certaines propriétés importantes (comme la positivité, notamment). Une piste intéressante repose sur les extensions FCT (pour *flux corrected transport* [?, ?])

pour les schémas distributifs. Celles-ci ont été développées par Hubbard et Roe [?, ?] et implantées¹⁴ dans AVBP pendant cette thèse. Bien qu'il semble que, d'un point de vue théorique, les méthodes FCT ne soient pas totalement satisfaisantes [?], les premiers résultats obtenus sont très encourageants. Il reste néanmoins à travailler sur l'adaptation de ces méthodes au système hyperbolique décrivant la phase dispersée, ce qui s'avère être une tâche ardue.

Enfin, pour simuler les écoulements instationnaires, on note que des extensions naturelles des schémas stationnaires sont développées au VKI et à Bordeaux [?, ?, ?] en introduisant des éléments spatiaux-temporels, afin d'obtenir, à la fois, la précision désirée et maintenir (en théorie et en pratique) les propriétés précédemment mentionnées des schémas stationnaires. Le seul inconvénient (dans le cadre d'AVBP) serait alors d'impliciter la discrétisation temporelle, ce qui n'est pas, pour l'instant, envisagé¹⁵.

4.8 Termes de diffusion

Dans cette partie, on va présenter les termes de diffusion utilisés dans AVBP. Il existe deux opérateurs différents. Le premier résulte de la formulation *cell-vertex* appliquée aux termes visqueux. Le second est une adaptation de la méthode éléments finis de Galerkin au code AVBP.

4.8.1 Opérateur *cell-vertex* (4Δ)

Cet opérateur correspond historiquement au premier implanté dans AVBP pour calculer la partie diffusive des équations de Navier-Stokes. La méthode de calcul suit exactement la description du calcul du résidu à la cellule (section 4.3), ainsi que la formule de l'équation nodale (4.12), pour obtenir le terme de diffusion au noeud j . Il reste donc à expliciter le calcul du flux diffusif ou plus précisément celui du gradient du vecteur solution.

Calcul du gradient

Le calcul du gradient du vecteur est basé sur l'hypothèse que le vecteur solution varie linéairement le long des arêtes, à la manière des flux, ce qui revient à écrire (4.26) et donc faire une approximation du produit des variables, comme on l'a expliqué section (4.5.5). Ce calcul est présenté par Crumpton et al. dans [?]. Selon ces auteurs, cette façon d'intégrer les flux diffusifs comme les flux convectifs est plus naturelle et consistante que de faire intervenir un volume de contrôle différent pour chaque phénomène. Le calcul du gradient au centre d'une cellule se fait de la même manière que le calcul de la divergence des flux (4.10) en écrivant que (dans le cas 3D) :

$$\vec{\nabla} \varphi = \vec{\nabla} \cdot (\varphi \vec{e}_x) \vec{e}_x + \vec{\nabla} \cdot (\varphi \vec{e}_y) \vec{e}_y + \vec{\nabla} \cdot (\varphi \vec{e}_z) \vec{e}_z \quad (4.97)$$

¹⁴ Avec l'aide précieuse d'Anthony Roux !

¹⁵ Le passage à une implication en temps nécessiterait de changer sensiblement le code.

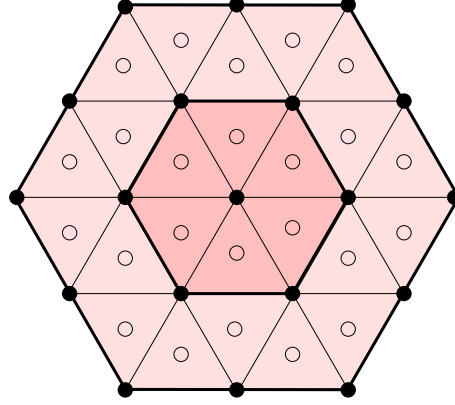


FIG. 4.14 - Noeuds et cellules utilisés pour le calcul du terme de diffusion $\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_j^V$ avec l'opérateur 4Δ au noeud situé au centre. Au centre des cellules sombres sont calculés les gradients $(\vec{\nabla}\mathbf{U})_e$ et termes de diffusion $(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^V)_e$ utilisés dans le calcul. Au centre des cellules claires sont calculés les gradients $(\vec{\nabla}\mathbf{U})_e$.

où φ est une variable scalaire quelconque. On a donc :

$$(\vec{\nabla}\mathbf{U})_e = -\frac{1}{dV_e} \sum_{k \in K_e} \mathbf{U}_k \vec{S}_k \quad (4.98)$$

Une fois le gradient à la cellule calculé, quel que soit le type d'élément considéré, le gradient est reconstruit au noeud j via une moyenne similaire à la formule (4.12) (opération *scatter*) :

$$(\vec{\nabla}\mathbf{U})_j = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{V_e}{n_v^e} (\vec{\nabla}\mathbf{U})_e \quad (4.99)$$

Divergence des flux

Les flux diffusifs sont calculés à partir des gradients aux noeuds :

$$\vec{\mathcal{F}}_j^V = \vec{\mathcal{F}}_h^V(\vec{x}_j) = \vec{\mathcal{F}}^V(\mathbf{U}_j, (\vec{\nabla}\mathbf{U})_j)$$

La divergence des flux diffusifs aux noeuds (résidu des flux diffusifs) est obtenue, en suivant la méthodologie décrite section (4.3), en appliquant consécutivement (4.10) puis (4.12), à l'instar des flux convectifs, mais toujours avec $\mathbf{D}_{j,e} = \frac{1}{n_v^e} \mathbf{Id}$, c'est-à-dire la matrice des différences centrées. Cela implique donc que les gradients varient linéairement le long des arêtes des cellules. Cette approximation ne pose pas de difficultés pratiques et le schéma est consistant et d'ordre 2.

Pour obtenir le terme de diffusion au noeud j , il faut donc procéder à deux opérations *scatter* (la première pour les gradients, la deuxième pour distribuer les résidus), ce qui rend le calcul du terme de diffusion coûteux. Cela revient aussi à dire que le *stencil* de ce schéma de diffusion est à 4Δ , c'est-à-dire que deux couches de cellules autour du noeud j sont exploitées pour le calcul (voir figure (4.14)).

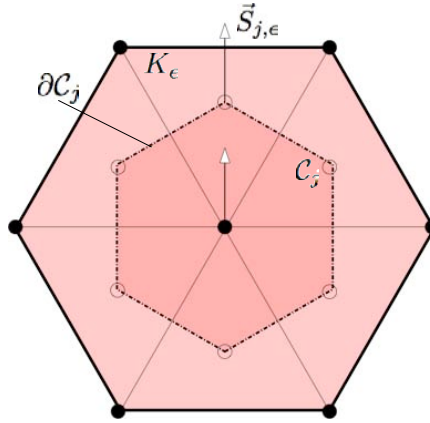


FIG. 4.15 - Noeuds et cellules utilisés pour le calcul du terme de diffusion $\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_j^V$ avec l'opérateur 2Δ au noeud situé au centre. Au centre des cellules sont calculés les flux $(\vec{\nabla} \mathbf{U})_e$.

En plus de son coût, ce schéma a pour défaut d'être très peu dissipatif (moins que l'opérateur qu'il approxime), en particulier pour les petites échelles. Son utilisation, dans le cadre de simulations d'écoulements turbulents instationnaires (LES), est donc plutôt déconseillée car les petites structures ne sont pas dissipées et les spectres d'énergie cinétique erronés (voir les THI dans [?]). En outre, cet opérateur ne dissipe absolument pas les *wiggles* dont la longueur d'onde est égale à 2Δ (ou $2h$), c'est-à-dire les oscillations numériques de plus petite longueur, présentes dans toute simulation numérique (mais d'une manière plus ou moins sensible) et souvent génératrices de divergence des résultats.

4.8.2 Opérateur (2Δ) - Méthode de Galerkin

Au vu des limitations de l'opérateur 4Δ , un deuxième opérateur a vu le jour dans AVBP. Celui-ci est basé sur la méthode de Galerkin. Il a été montré que l'opérateur de diffusion ainsi obtenu peut être exprimé comme un schéma *fluctuation splitting* (donc *cell-vertex*) sur des éléments linéaires [?]. Cependant, à proprement parler, il ne s'agit pas d'un schéma *cell-vertex* mais *vertex-centred* comme on va le voir.

Comme l'a indiqué Colin [?], la construction du schéma 2Δ dans AVBP ne s'appuie pas sur une application stricte de la méthode des éléments finis de Galerkin, car la formulation exacte devient alors assez lourde dans certains cas (équation de la quantité de mouvement par exemple). La méthodologie adoptée permet toutefois d'obtenir un résultat similaire.

Le schéma obtenu à partir de la méthode de Galerkin est donc équivalent à un schéma volumes finis *vertex-centred* pour des éléments P1 [?]. Ainsi, le volume de contrôle associé au noeud j n'est pas une cellule primale du maillage. Ici, le calcul de la divergence des flux ne se fait donc pas au centre des cellules comme dans l'équation (4.10)), mais dans le volume de contrôle associé au noeud j , qu'on considère loin des bords ici (figure (4.15)). En utilisant la relation (4.41) :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^V \Big|_j &\approx \frac{1}{V_j} \int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h^V \phi_j d\mathcal{V} = -\frac{1}{V_j} \int_{\Omega} \vec{\mathcal{F}}_h^V \cdot \vec{\nabla} \phi_j d\mathcal{V} \\ &= \frac{1}{V_j} \int_{\partial C_j} \vec{\mathcal{F}}_h^V \cdot \vec{n} dS \end{aligned} \quad (4.100)$$

La discrétisation de l'équation (4.100) s'écrit alors ¹⁶ :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^V \Big|_j = \frac{1}{dV_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \vec{\mathcal{F}}_{j,e}^V \cdot \vec{S}_{j,e} \quad (4.101)$$

où la normale $\vec{S}_{j,e}$ est associée au noeud j , dans la cellule K_e et il reste à expliciter la définition de $\vec{\mathcal{F}}_{j,e}^V$. Dans le cas de l'opérateur de diffusion à 4Δ , aucune distinction n'est faite selon l'élément. Ici, à l'instar des schémas de convection éléments finis, il existe une différence selon qu'on traite des éléments P1 (linéaires) et des éléments bi ou tri-linéaires. Pour des éléments linéaires, les gradients sont constants au sein de chaque cellule (cf. fonctions de forme) donc :

$$\vec{\mathcal{F}}_{j,e}^V = \vec{\mathcal{F}}_e^V = \vec{\mathcal{F}}^V((\vec{\nabla}\mathbf{U})_e).$$

Dans le cas des éléments non linéaires, en revanche, on utilise, pour calculer les flux, des reconstructions éléments finis de Galerkin. Cette reconstruction utilise la même méthodologie que celle évoquée pour les schémas Taylor-Galerkin, section 4.6.3, soit :

$$\vec{\mathcal{F}}_{j,e}^V = \vec{\mathcal{F}}^V((\vec{\nabla}\mathbf{U})_e) + \vec{\mathcal{F}}^V((\delta\vec{\nabla}\mathbf{U})_{j,e}).$$

Au final, la méthode de Galerkin n'est donc pas appliquée à la variable considérée, mais au flux correspondant (construit à partir des gradients de cette variable). Colin [?] a cependant montré que les deux méthodes sont équivalentes, sauf pour des pyramides. On notera que ce développement est très proche de celui fait pour exprimer les dérivées secondes, pour les schémas Taylor-Galerkin.

Cet opérateur ne fait intervenir que les noeuds appartenant aux cellules adjacentes au noeud j . Ainsi, le *stencil* de l'opérateur est de 2Δ et la conséquence principale, par rapport à son vis-à-vis à 4Δ , est qu'il dissipe les petites échelles. Son comportement physique est, dès lors, beaucoup plus physique et il peut être utilisé pour les calculs turbulents, car il évite de voir l'énergie cinétique s'accumuler aux longueurs d'onde inférieures à 4Δ .

Un des défauts principaux de ce schéma vient de son inconsistance sur certaines connectivités [?]. Sur un maillage pour lequel la connectivité des noeuds ne change pas, il n'y a aucun problème. En revanche, dans le cas contraire, la dérivée seconde peut être mal calculée. Néanmoins, en moyenne sur un élément, celle-ci reste exacte, ce qui signifie que la solution globale n'est finalement pas affectée et l'inconsistance est locale.

Cet opérateur est celui utilisé dans les calculs LES de cette thèse.

4.9 Calcul des termes sources

On l'a vu dans les chapitres précédents, les termes sources peuvent permettre de modéliser différents phénomènes physiques : dégagement de chaleur, création ou disparition d'une ou plusieurs espèces, flux radiatifs, évaporation... Leur calcul peut suivre deux méthodes de discrétisation : soit ces termes sont traités par un opérateur volumes finis *vertex-centred*, soit on utilise un opérateur orienté éléments finis, en accord avec la méthode *cell-vertex*.

Quelle que soit la méthode employée, on considérera le terme source comme constant au sein du volume de contrôle sur lequel est réalisé le calcul.

¹⁶On notera que contrairement à ce qui est obtenu dans la formule (4.10), il n'y a pas de signe "-" qui apparaît.

Terme source *vertex-centred*

L'intégration spatiale du terme source se fait à l'endroit de la mise à jour temporelle. On l'a dit précédemment, les variables sont stockées aux noeuds du maillage. Ainsi, l'intégrale relative au terme source \mathbf{S} s'écrit sur le volume de contrôle lié au noeud j , soit :

$$\int_{\mathcal{C}_j} \mathbf{S} d\mathcal{V}$$

Etant donné l'hypothèse évoquée au paragraphe précédent, le terme source *vertex-centred* , une fois discrétisé, s'exprime de la manière suivante :

$$\boxed{\int_{\mathcal{C}_j} \mathbf{S} d\mathcal{V} = \mathbf{S}_j V_j} \quad (4.102)$$

et $\mathbf{S}_j = \mathbf{S}(\mathbf{U}_j)$ est une valeur calculée directement avec les variables stockées au noeud j .

Cette formulation a pour principal avantage d'être extrêmement simple à coder car faisant intervenir uniquement les variables au lieu où est calculé le terme source. Il faut, en revanche, remarquer qu'en conséquence, elle est aussi assez peu précise et que le terme source peut aussi varier de manière très brusque (ce que l'on essaie de limiter dans une certaine mesure).

Terme source éléments finis

Une manière plus précise de calculer le terme source revient à appliquer la méthode *cell-vertex* (et donc ici la méthode des résidus pondérés avec une projection sur les fonctions de formes éléments finis) au terme source. Une fois de plus, cette opération se fait en deux étapes. Le volume de contrôle est ici la cellule du maillage et on calcule, dans un premier temps, la contribution de cette cellule pour un noeud j lui appartenant :

$$\int_{K_e} \mathbf{S} \phi_j d\mathcal{V} = \frac{\mathbf{S}_e V_e}{n_v^e} \quad (4.103)$$

et ici, $\mathbf{S}_e = \mathbf{S}(\bar{\mathbf{U}}_e)$ est calculé avec la moyenne des variables prises au centre de la cellule $\bar{\mathbf{U}}_e = \sum_{k \in K_e} \mathbf{U}_k / n_v^e$. Une fois calculées, les contributions sont sommées au noeud j :

$$\int_{\Omega} \mathbf{S} \phi_j d\mathcal{V} = \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{\mathbf{S}_e V_e}{n_v^e} \quad (4.104)$$

Cette formulation est certes plus lourde à mettre en place et plus coûteuse (on fait appel à l'opération *scatter*). Elle est aussi plus précise que la précédente et c'est en général la méthode adoptée dans AVBP. Enfin, on peut faire remarquer que, dans l'esprit, la première formulation correspond aux méthodes *cell-centre* et *vertex-centred* , alors que la seconde est relative à la méthode *cell-vertex* , ce qui montre là encore l'intérêt des schémas *cell-vertex* en terme de précision [?].

4.10 Discrétisation temporelle

Dans cette partie, on s'intéresse à la façon dont s'exprime la mise à jour temporelle notée $\delta \mathbf{U}_j$ dans :

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n + \Delta t \delta \mathbf{U}_j^n, \quad (4.105)$$

ainsi qu'au calcul de Δt .

4.10.1 Avancements temporels

Trois méthodes d'avancement temporel existent dans AVBP. Toutes sont explicites et très communément appliquées dans le monde de la CFD. La première a déjà été évoquée, il s'agit de la discrétisation totale suivant la méthodologie de Lax et Wendroff [?]. Elle est basée sur un développement en série de Taylor en temps, dans lequel les dérivées temporelles sont remplacées par des dérivées spatiales de même ordre (voir section 4.4.2). On peut alors exprimer facilement la mise à jour temporelle et celle-ci s'écrit :

$$\delta \mathbf{U}_j^n = -\mathbf{N}_j^{n,LW} \quad (4.106)$$

La seconde n'est qu'une variante de la première, mais en deux étapes. Il s'agit de la discrétisation totale suivant la méthode Taylor-Galerkin à 2 étapes (schémas TTG). On peut l'écrire de manière synthétique :

$$\begin{cases} \sum_k \mathcal{M}_{jk} \delta \tilde{\mathbf{U}}_j^n = -\tilde{\mathbf{N}}_j^{n,TTG} V_j & (prediction) \\ \sum_k \mathcal{M}_{jk} \delta \mathbf{U}_j^n = -\mathbf{N}_j^{n,TTG} V_j & (correction) \end{cases} \quad (4.107)$$

où $\tilde{\mathbf{N}}_j^{n,TTG}$ et $\mathbf{N}_j^{n,TTG}$ sont calculés à partir des équations (4.90) et (4.91) respectivement et \mathcal{M}_{jk} sont les composantes de la j -ième ligne de la matrice de masse.

La troisième méthode d'avancement en temps est différente des deux premières. Il s'agit d'une intégration de type Runge-Kutta. Ici, la séparation entre discrétisations spatiale et temporelle est franche. Il s'agit d'une méthode des lignes dont le but est de résoudre l'équation aux dérivées ordinaires (4.13). La forme générale de la méthode de Runge-Kutta à M étapes est la suivante [?]¹⁷ :

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^{(1)} &= \mathbf{U}^n \\ \mathbf{U}^{(2)} &= \mathbf{U}^n - \Delta t \alpha_2 \mathbf{N}^{(1)} \\ \mathbf{U}^{(3)} &= \mathbf{U}^n - \Delta t \alpha_3 \mathbf{N}^{(2)} \\ &\vdots \\ \mathbf{U}^{(M)} &= \mathbf{U}^n - \Delta t \alpha_M \mathbf{N}^{(M-1)} \\ \mathbf{U}^{n+1} &= \mathbf{U}^n - \Delta t \sum_{p=1}^M \beta_p \mathbf{N}^{(p)} \end{aligned} \quad (4.108)$$

¹⁷On fait abstraction de l'indexage spatial ici pour alléger les notations

et pour assurer la consistance de la formule : $\sum_{p=1}^M \beta_p = 1$. Par ailleurs, il faut noter ici que $\mathbf{N}^{(p)}$ signifie : $\mathbf{N}^{(p)} = \mathbf{N}(\mathbf{U}^{(p)})$. Il existe un très grand nombre de combinaisons possibles. Les plus connues sont le schéma prédictor-correcteur de Heun et le schéma Runge-Kutta 4 employé par Jameson et al. [?, ?, ?]). Dans AVBP, la version utilisée est, à l'instar de NTMIX [?], le schéma Runge-Kutta à faible stockage, en général à 3 étapes (bien qu'on puisse l'utiliser avec 1 à 5 étapes). Le principe est de n'utiliser à la dernière étape (4.108) que l'opérateur calculé avec la solution de l'étape précédente (seul le coefficient β_M est non-nul et égal à 1 et on a : $\beta_M = \alpha_{M+1}$). Ainsi ne sont stockées que la solution au pas de temps n et la solution intermédiaire. Les coefficients pour les schémas utilisables dans AVBP sont résumés dans le tableau (4.3)¹⁸.

Schémas (M étapes)	α_2	α_3	α_4	α_5	β_M	Commentaires
1 (Euler)	0	0	0	0	1	instable avec un schéma centré
2 (Heun)	1/2	0	0	0	1	instable avec un schéma centré
3	1/3	1/2	0	0	1	cond. stable avec un schéma centré
4	1/4	1/3	1/2	0	1	cond. stable avec un schéma centré
5	1/5	1/4	1/3	1/2	1	cond. stable avec un schéma centré

TAB. 4.3 - Coefficients α_p utilisés pour les différents schémas Runge-Kutta à faible stockage dans AVBP.

Jusqu'à présent, on ne considérait pas le schéma d'intégration spatiale, seule la dépendance en temps de la solution \mathbf{U} était prise en compte. Le choix du pas de temps est néanmoins primordial pour garantir la stabilité de la méthode numérique.

4.10.2 Calcul du pas de temps

Un des paramètres les plus importants dans une simulation numérique (instationnaire !) est le pas de temps Δt . Celui-ci a un impact considérable sur la stabilité du calcul et sa précision. L'utilisateur peut le fixer mais, en général, la méthode numérique employée n'étant jamais inconditionnellement stable dans AVBP, on préfère fixer d'autres paramètres permettant de calculer le pas de temps, de façon à assurer (en théorie, au moins) la stabilité de la simulation. Ces paramètres sont les nombres de Courant et de Fourier, entre autres.

CFL

Le CFL ou nombre de CFL (pour Courant-Friedrichs-Lewy) qu'on notera ν est un paramètre permettant d'assurer la stabilité du schéma numérique de **convection**. La condition CFL est alors simplement définie par :

$$\nu \leq \nu_c \quad (4.109)$$

où ν_c est la valeur limite assurant la convergence L^2 de la méthode numérique considérée. On choisit alors Δt de façon à respecter cette condition. Dans un cas monodimensionnel (maillage régulier...), la

¹⁸Il faut noter que les coefficients proposés correspondent aux coefficients permettant d'obtenir la série de Taylor en temps de \mathbf{U} d'ordre le plus élevé. Un grand nombre de combinaisons existe en réalité, on peut en effet chercher à augmenter le domaine de stabilité plutôt que la précision. Le schéma RK3, par exemple, est souvent utilisé avec un coefficient α_2 égal à 1/2, plutôt que 1/3 pour améliorer la stabilité du schéma complet obtenu.

formulation discrète d'une équation du même type que (4.25) fait apparaître le pas de temps et le pas d'espace h . Le CFL s'écrit alors :

$$\nu = \frac{c\Delta t}{h}.$$

Dans le cas d'un schéma multidimensionnel et d'un système d'équations hyperboliques, il s'avère plus difficile d'exprimer le pas de temps à partir du CFL. La stabilité de la discrétisation du système d'équation (4.5) est assurée si, et seulement si, la condition de stabilité du schéma numérique est respectée pour la grandeur caractéristique se propageant le plus vite. Cette vitesse caractéristique est obtenue en calculant le rayon spectral ρ de la Jacobienne des flux. Dans le cas des équations d'Euler monodimensionnelles (avec la vitesse de convection $u > 0$), il est égal à :

$$\rho(\mathbf{A}) = u + c,$$

avec ici \mathbf{A} la Jacobienne et c la vitesse du son. La grandeur caractéristique associée ici est l'onde acoustique se propageant dans le sens de l'écoulement. Lorsque u et c varient, le calcul du pas de temps est réalisé sur tous les volumes de contrôle et on choisit alors la plus petite valeur obtenue sur l'ensemble du domaine de calcul.

Le passage à une dimension $d > 1$ complexifie encore le calcul bien que le principe soit toujours le même. Dans AVBP, le pas de temps (à partir du schéma de convection) pour une cellule K_e est donné par :

$$\Delta t_e^C = \nu \frac{V_e}{\sqrt{\sum_{k \in K_e} (\lambda_k^{(max)})^2}} \quad (4.110)$$

avec $\lambda_k^{(max)}$ le rayon spectral de la matrice :

$$\frac{1}{d} \vec{\mathcal{A}}_e \cdot \vec{S}_k.$$

Au final, le pas de temps utilisé est :

$$\Delta t^C = \min_{e \in \mathcal{T}_h} (\Delta t_e^C).$$

Les limites de stabilité (fournies par ν_c) seront évoquées pour des cas mono- et bidimensionnels dans le chapitre suivant.

Nombre de Fourier

Le nombre de Fourier F est le pendant du nombre CFL pour la diffusion. Son calcul repose globalement sur les mêmes idées que le CFL [?], c'est à dire qu'on détermine le pas de temps de façon à assurer :

$$\boxed{F \leq F_c} \quad (4.111)$$

Dans un calcul monodimensionnel, sa définition est la suivante :

$$F = \frac{D\Delta t}{h^2},$$

où D est un coefficient de diffusion. Dans AVBP, le pas de temps à la cellule K_e est donné par :

$$\boxed{\Delta t_e^V = \frac{F\Delta^2}{D}} \quad (4.112)$$

où D est un coefficient de diffusion (proportionnel à la viscosité cinématique) et Δ est une longueur de référence définie ici par :

$$\Delta^2 = \frac{2V_e}{\frac{1}{d^2} \sum_{k \in K_e} S_k^2}.$$

Là aussi, le pas de temps utilisé pour le calcul est le plus petit déterminé sur l'ensemble du domaine de calcul, soit :

$$\Delta t^V = \min_{e \in \mathcal{T}_h} (\Delta t_e^V).$$

Dans cette thèse, on s'intéresse surtout aux schémas de convection, donc on n'évoquera pas les limites de stabilité du schéma de diffusion dans les chapitres qui suivent. Il faut cependant retenir que la condition de stabilité du schéma 2Δ sur des maillages réguliers en 1D, avec une intégration temporelle d'Euler (explicite), est $F_c = \frac{1}{2}$.

Termes sources d'espèces chimiques

Il existe une condition de plus intégrée dans le calcul du pas de temps. Celle-ci est liée à la présence des termes sources et n'est pas en soi un critère de stabilité. Les termes sources (prenons l'exemple des termes $\dot{\omega}$ de la chimie) sont parfois des fonctions très raides du temps et non linéaires. Si le pas de temps est trop grand, on peut se trouver dans une situation où une fraction massique devient négative ou supérieure à 1. En soi, cela n'entraîne pas forcément une divergence du calcul. Cependant, la physique interdit ce genre de valeur et pour les éviter, un calcul de pas de temps "chimique" est réalisé dans AVBP. Celui-ci s'écrit :

$$\Delta t^{source} = \chi \min_j (\min_{spec} \Delta t_j^{spec})$$

où χ est le seuil fixé par l'utilisateur en fonction de la chimie utilisée pour la simulation et Δt_j^{spec} est le pas de temps calculé au noeud j pour une espèce chimique donnée. Ce pas de temps est déterminé de la façon suivante :

$$\Delta t_j^{spec} = \frac{\rho_j}{|\dot{\omega}_j^{spec}|}$$

Au final, le pas de temps utilisé pour un calcul d'écoulement réactif dans AVBP est :

$$\Delta t = \min(\Delta t^C, \Delta t^V, \Delta t^{source})$$

Le choix du seuil χ est délicat. χ représente grossièrement la variation relative de ρ_j due à la réaction pendant un pas de temps. Si χ dépasse 0, 1, des problèmes sont à attendre en général (voir, par exemple, le livre de Oran et Boris [?]) sur l'intégration des systèmes d'EDO avec termes sources).

4.11 Viscosité artificielle

Les opérateurs de convection utilisés dans AVBP sont centrés en espace. Ceux-ci, on le verra par la suite, ont des difficultés à transporter les forts gradients et sont sujets au phénomène de Gibbs (oscillations numériques ou *wiggles* au niveau des discontinuités). Malheureusement, l'opérateur de diffusion n'est généralement pas suffisant pour les dissiper, dès que le nombre de Reynolds est élevé, ce qui est le cas en LES. Cette particularité peut s'avérer particulièrement gênante car susceptible d'entraîner la divergence du calcul lorsqu'elle concerne des grandeurs bornées, comme la pression. Pour pallier à ce problème, différentes solutions sont possibles et l'une d'elles, adoptée dans AVBP est l'emploi d'opérateurs de diffusion artificielle dont le but est de lisser les gradients et supprimer les *wiggles*.

L'emploi de viscosité artificielle remonte aux travaux de Von Neumann et Richtmeyer [?, ?] qui avaient introduit une pression additionnelle dans les équations d'Euler (quantité de mouvement et énergie) calculée à partir de la divergence de la vitesse pour pouvoir supporter les chocs forts. Baldwin et MacCormack ont ensuite introduit des viscosités artificielles d'ordres plus élevés, afin qu'elles agissent encore plus fortement au niveau des chocs mais aussi qu'elles préservent la précision de la solution loin de ceux-ci. Jameson, Schmidt et Turkel [?] ont perfectionné l'utilisation de la viscosité artificielle, en utilisant la combinaison linéaire d'opérateurs de viscosité (ordre 2) et d'hyperviscosité (ordre 4) et obtenant, de ce fait, d'excellents résultats en aérodynamique stationnaire. Ces opérateurs ont été adaptés plus tard à l'approche *cell-vertex* [?, ?, ?, ?]. Ils sont ajoutés directement à l'équation nodale (4.12), soit¹⁹ :

$$\frac{d\mathbf{U}_j}{dt} = - \left(\mathbf{N}_j + \left(\mathbf{D}_j^{(2*)} + \mathbf{D}_j^{(4*)} \right) \right) \quad (4.113)$$

et les termes $\mathbf{D}_j^{(2*)}$ et $\mathbf{D}_j^{(4*)}$ représentent les viscosité d'ordre 2 et 4 respectivement, et sont fonctions des opérateurs $\mathbf{D}_j^{(2)}$ et $\mathbf{D}_j^{(4)}$ que l'on va décrire dans les paragraphes suivants.

4.11.1 Viscosité artificielle du second ordre

Pseudo-Laplacien

L'opérateur de viscosité artificielle d'ordre 2 repose sur l'utilisation d'un *pseudo-Laplacien*, comme l'a décrit Crumpton [?], afin d'ajouter une dissipation supplémentaire dans l'équation aux différences au

¹⁹Dans le cas des éléments finis, l'expression de l'équation nodale est légèrement différente : tous les termes de droite sont multipliés par le volume au noeud et il faut considérer la matrice de masse ! Dans tous les développements et analyses qui suivront, on ne considère pas ce détail pour la viscosité artificielle et on fera l'hypothèse de condensation de la matrice de masse.

noeud j . Son expression est la suivante :

$$\mathbf{D}_j^{(2)} = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} -\frac{\epsilon^{(2)} \zeta_e V_e}{n_v^e \Delta t} (\bar{\mathbf{U}}_e - \mathbf{U}_j) \quad (4.114)$$

Le facteur V_e/n_v^e permet, à cet opérateur, de préserver la linéarité d'une solution (ordre 2 en stationnaire). $\epsilon^{(2)}$ est un paramètre utilisateur et ζ_e est un senseur permettant de détecter les forts gradients et évitant, ainsi, d'activer l'opérateur $\mathbf{D}_j^{(2)}$ dans tout le domaine de calcul.

Senseurs ζ_e

Le senseur ζ_e a été introduit par Jameson et al. [?]. Il est calculé à chaque cellule et sa valeur est comprise entre 0 et 1, cette valeur indiquant les zones où un maximum de viscosité artificielle doit être appliqué. Le senseur est construit en comparant deux évaluations de la variation d'un scalaire de référence (pression, énergie totale, fraction massique, nombre de gouttes...), réalisées sur deux stencils différents. Si les évaluations sont identiques, la solution est linéaire et $\zeta_e = 0$. Sinon le senseur se déclenche. L'important ici est que le senseur soit non nul, là où cela est utile. On va présenter ici les différents senseurs utilisés dans AVBP, pour contrôler la viscosité d'ordre 2.

Senseur de Jameson On le note ζ_e^J . Pour tout élément K_e , il correspond au maximum, sur l'ensemble des sommets, de l'évaluation ζ_k^J :

$$\zeta_e^J = \max_{k \in K_e} \zeta_k^J \quad (4.115)$$

ζ_k^J est définie pour un scalaire S donné :

$$\zeta_k^J = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |S_k|} \quad (4.116)$$

où Δ_1^k et Δ_2^k sont des mesures de variation de S dans la cellule qu'on explicite par :

$$\Delta_1^k = \bar{S}_e - S_k \quad (4.117)$$

$$\Delta_2^k = (\vec{\nabla} S)_k \cdot (\vec{x}_e - \vec{x}_k) \quad (4.118)$$

où \bar{S}_e est la valeur moyenne du scalaire S dans la cellule. On précisera ensuite quelle variable est utilisée, en lieu et place du scalaire S . Il convient ici de préciser que l'évolution du senseur de Jameson est régulière et douce, dès que la solution n'est plus linéaire.

Senseur de Colin Comme le souligne Colin [?], le senseur de Jameson n'est pas conçu pour des écoulements turbulents instationnaires (il a été introduit dans le cadre de la résolution d'écoulements

aérodynamiques stationnaires), car il n'est nul que pour des gradients de pression constants au sein des cellules (solution linéaire). Or, dans une LES, il existe de nombreuses petites structures, assez peu résolues (sur peu de points), qui ont pour effet de déclencher le senseur et donc provoquer une application injustifiée de viscosité artificielle. L'effet obtenu est, évidemment, la dissipation des petites échelles résolues de la turbulence, ce qui rend le senseur de Jameson inutilisable pour une LES.

Colin [?] a donc défini un nouveau senseur ζ_e^C , plus approprié aux écoulements turbulents fortement instationnaires. Celui-ci devant être, à la fois, nul lorsque l'écoulement est suffisamment bien résolu et agir de façon sensible dans les zones de fortes non-linéarités. Les caractéristiques de ce senseur sont les suivantes :

- ζ_e^C est très petit lorsque Δ_1^k et Δ_2^k sont petites comparées à S_e . Ceci correspond à des erreurs numériques de faible amplitude (si Δ_1^k et Δ_2^k sont de signes opposés) ou à des faibles gradients bien résolus par le schéma (si Δ_1^k et Δ_2^k sont de même signe).
- ζ_e^C est petit lorsque Δ_1^k et Δ_2^k sont du même signe et du même ordre de grandeur (même s'il est grand). Ceci correspond aux gradients raides mais bien résolus par le schéma numérique.
- ζ_e^C est grand lorsque Δ_1^k et Δ_2^k sont de signes opposés et qu'un des deux est beaucoup plus grand que l'autre. Ceci correspond à une oscillation numérique de grande amplitude.
- ζ_e^C est grand si Δ_1^k et Δ_2^k est du même ordre de grandeur que S_e . Ceci correspond à une situation non physique résultant d'un problème numérique.

Il faut noter ici que ce senseur peut être utilisé pour l'équation de conservation des fractions massiques : la valeur de référence pour S_k est alors remplacée par 1, qui correspond au maximum d'une fraction massique.

La définition du senseur est la suivante :

$$\zeta_e^C = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{\Psi - \Psi_0}{\delta} \right) \right) - \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{-\Psi_0}{\delta} \right) \right) \quad (4.119)$$

$$\text{avec : } \Psi = \max_{k|k \in K_e} \left(0, \frac{\Delta^k}{|\Delta^k| + \epsilon_1 S_k} \zeta_k^J \right) \quad (4.120)$$

$$\Delta^k = |\Delta_1^k - \Delta_2^k| - \epsilon^k \max(|\Delta_1^k|, |\Delta_2^k|) \quad (4.121)$$

$$\epsilon^k = \epsilon_2 \left(1 - \epsilon_3 \frac{\max(|\Delta_1^k|, |\Delta_2^k|)}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |S_k|} \right) \quad (4.122)$$

et les constantes du modèle ont pour valeur :

$$\Psi_0 = 2.10^{-2} \quad \delta = 1.10^{-2} \quad \epsilon_1 = 1.10^{-2} \quad \epsilon_2 = 0.95 \quad \epsilon_3 = 0.5$$

4.11.2 Viscosité artificielle du quatrième ordre

On s'intéresse ici au terme discret $\mathbf{D}_j^{(4)}$. Il s'agit d'un opérateur d'hyperdiffusion artificielle. Son rôle est de supprimer les oscillations noeud à noeud (à l'origine, il permettait, dans les cas stationnaires, d'équilibrer le nombre d'équations avec le nombre d'inconnues, en particulier lors de la présence de lignes soniques [?]) qui ne sont pas amorties par les méthodes *cell-vertex*. Contrairement à la diffusion artificielle d'ordre 2, qui est déclenchée en cas de besoin par les senseurs décrits précédemment, l'hyperdiffusion est activée dans l'ensemble du domaine (sauf là où la diffusion d'ordre 2 agit, voir plus

loin). Il s'agit donc d'un traitement de fond et s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbf{D}_j^{(4)} = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{\epsilon_e^{(4*)} V_e}{n_v^e \Delta t} \left[\left(\frac{1}{n_v^e} \sum_{k \in K_e} \vec{\nabla} \mathbf{U}_k \right) \cdot (\vec{x}_e - \vec{x}_j) - (\mathbf{U}_e - \mathbf{U}_j) \right] \quad (4.123)$$

A l'instar du pseudo-laplacien, le terme V_e/n_v^e permet d'assurer, à cet opérateur, la conservation de la linéarité de la solution, condition *sine qua non* pour ne pas dégrader la précision du schéma numérique de base. Le paramètre $\epsilon^{(4*)}$ s'écrit plus précisément :

$$\epsilon_e^{(4*)} = \max(0, \epsilon^{(4)} - \zeta_e \epsilon^{(2)}), \quad (4.124)$$

et $\epsilon^{(4)}$ est un paramètre fixé par l'utilisateur. La formulation (4.124) provient de [?]. Ce choix a été fait, afin d'éviter la réapparition d'oscillations non physiques, là où une grande quantité de viscosité artificielle d'ordre 2 est ajoutée (discontinuités ou chocs).

4.11.3 Application des opérateurs de viscosité artificielle

On va ici expliciter les opérateurs $\mathbf{D}_j^{(2*)}$ et $\mathbf{D}_j^{(4*)}$. Il existe plusieurs stratégies d'application de viscosité artificielle. On se place dans un cas 2D, la généralisation à la troisième dimension étant triviale. Ici on pose $\mathbf{U} = (\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho_k)^T$ pour les deux premiers modèles présentés.

Modèle de Jameson (gaz)

Le premier modèle disponible est celui de Jameson et consiste à appliquer les opérateurs décrits précédemment à toutes les variables. Les scalaires de référence utilisés sont la pression et les fractions massiques.

$$\zeta_e = \max(\zeta_e^J(P), \zeta_e^Y) \quad \text{avec :} \quad \zeta_e^Y = \max_{k=1, neqs} (\zeta_e^C(\rho_k))$$

Et on a :

$$\mathbf{D}_j^{(2*)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{D}_j^{(2)} \quad (4.125)$$

ainsi que :

$$\mathbf{D}_j^{(4*)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{D}_j^{(4)} \quad (4.126)$$

Pour simuler des phénomènes transitoires dont l'intérêt est faible mais qui demeurent extrêmement difficiles à stabiliser, il arrive que la valeur de ζ_e soit automatiquement fixée à 1. Evidemment, cette option n'est utilisée qu'en cas de force majeure (option *iavisc* = -1 dans AVBP).

Modèle de Colin (gaz)

Le second modèle va de pair avec l'introduction du senseur de Colin. Le principe est assez similaire, mais toujours dans l'idée de l'utiliser pour des LES. Le choix de Colin est de ne pas interférer avec le schéma numérique pour la résolution de l'équation de quantité de mouvement. Aucune dissipation de fond n'est donc introduite dans cette équation. Le calcul senseur ζ_e , logiquement, n'utilise que la définition de Colin. Les scalaires de référence sont l'énergie totale et les fractions massiques :

$$\zeta_e = \max(\zeta_e^C(\rho E), \zeta_e^Y) \quad \text{avec :} \quad \zeta_e^Y = \max_{k=1, neqs} (\zeta_e^C(\rho_k))$$

Et on a :

$$\mathbf{D}_j^{(2*)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{D}_j^{(2)} \quad (4.127)$$

ainsi que :

$$\mathbf{D}_j^{(4*)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{D}_j^{(4)} \quad (4.128)$$

Modèle de Riber (phase dispersée)

Ce modèle est uniquement relatif à la résolution des équations de la phase dispersée et a été développé par Riber [?] et ne dépend pas du modèle choisi pour le gaz. Ici on pose $\mathbf{U} = (\rho_l \alpha_l, \rho_l \alpha_l u_l, \rho_l \alpha_l v_l, \rho_l \alpha_l h_l, n_l)^T$. Celui-ci est basé sur le modèle de Jameson avec quelques modifications des senseurs (pour éviter en particulier que le senseur s'active trop souvent). En effet, dans ce cas, les senseurs au sommet s'écrivent pour ces variables :

$$\zeta_k^R(\rho_l \alpha_l) = \left(\frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + (\rho_l \alpha_l)_k} \right)^2 \quad (4.129)$$

$$\zeta_k^R(n_l) = \left(\frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + (n_l)_k} \right)^2 \quad (4.130)$$

$$\zeta_k^R(\rho_l \alpha_l u_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + (V_e/\Delta t)^{1/3}} \quad (4.131)$$

$$\zeta_k^R(\rho_l \alpha_l h_l) = \frac{|\Delta_1^k - \Delta_2^k|}{|\Delta_1^k| + |\Delta_2^k| + |(\rho_l \alpha_l h_l)_k|} \quad (4.132)$$

et $\zeta_k^R(\rho_l \alpha_l v_l)$ est calculé comme $\zeta_k^R(\rho_l \alpha_l u_l)$. De là sont calculés les senseurs aux cellules de la même manière que pour les senseurs de Jameson et Colin. Enfin le senseur ζ_e s'écrit :

$$\zeta_e = \max \left(\zeta_k^R(\rho_l \alpha_l), \zeta_k^R(n_l), \zeta_k^R(\rho_l \alpha_l u_l), \zeta_k^R(\rho_l \alpha_l v_l), \zeta_k^R(\rho_l \alpha_l h_l) \right)$$

Le reste de la procédure est identique au modèle de Jameson.

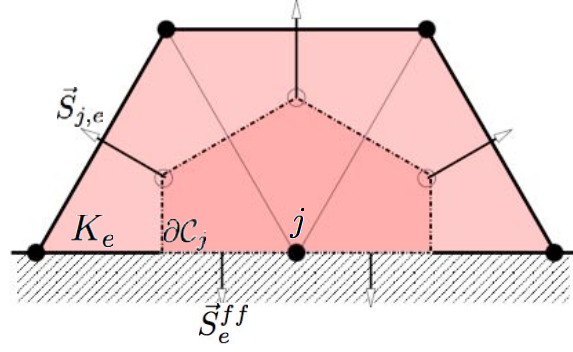
Remarques

Les modèles présentés ci-dessus sont des modèles de dissipation scalaire, ce qui signifie que pour une variable donnée, les opérateurs de viscosité artificielle n'utilisent que cette variable dans leur construction, ce qui peut provoquer des comportements parfois assez éloignés de la physique. Un des défauts de ces opérateurs vient de l'excès de diffusion croisée (*cross-diffusion*) qu'ils peuvent appliquer. Certains travaux [?] ont été menés, afin d'introduire plus de physique dans le comportement de ces opérateurs en les construisant d'une manière assez similaire aux schémas upwind. Les opérateurs obtenus ne sont alors plus scalaires mais tensoriels. Toutefois, ceux-ci restent très lourds à mettre en oeuvre, en particulier, dès lors que le code de calcul est écrit pour des maillages non-structurés.

4.11.4 Viscosités de compression

Viscosité Von Neumann - Richtmeyer

Comme on l'a dit précédemment, la première viscosité artificielle introduite dans un calcul est due à Von Neumann et Richtmeyer [?, ?]. Qu'il s'agisse d'un calcul monophasique ou diphasique, le but est ici d'introduire un terme de pression supplémentaire (ajoutée aux équations de quantité de mouvement et d'énergie totale pour la phase continue et sur la vitesse pour la phase dispersée). Sa construction est basée sur la divergence de la vitesse (du gaz ou du liquide). On notera qu'il existe, en outre, des modèles de viscosité similaires, d'ordre plus élevé introduits par Cook et Cabot [?].

FIG. 4.16 - Volume de contrôle et normales pour un noeud j situé sur $\partial\Omega$.

4.12 Schémas de bords et conditions aux limites

Jusqu' alors, on n'a pas considéré les limites du domaine de calcul Ω . Or, la façon dont elles sont traitées s'avère cruciale, comme on le verra par la suite. Deux points sont à considérer et seront décrits :

- *Les schémas numériques au bord ou schémas de bord.* Il s'agit de la manière dont sont discrétisées les équations aux bords. La discrétisation spatiale est en effet modifiée car le *stencil* au bord ne correspond pas du tout à celui qu'on a au centre du domaine (au moins dans la direction normale à $\partial\Omega$). Les schémas de bord sont souvent négligés, en particulier dès qu'on sort des méthodes des différences finies et des maillages structurés, car il devient alors difficile de compenser la réduction du stencil. Pourtant, l'ordre de précision du schéma peut avoir une très forte influence sur la qualité de la solution.
- *Les conditions limites.* Elles peuvent être de différentes natures, en fonction du phénomène physique qu'elles permettent de décrire. Dans un code permettant de résoudre l'écoulement d'un fluide compressible, la gestion des différentes ondes, en particulier de nature acoustique, est primordiale afin d'éviter des réflexions non physiques.

4.12.1 Schémas de bords

Ordre de convergence

Compte tenu de la construction du résidu aux noeuds avec l'équation (4.12), il apparaît clairement, comme l'illustre la figure (4.16), que le noeud $j \in \partial\Omega$ ne reçoit des contributions que d'un côté. En 1D, sur un maillage régulier, l'opérateur de convection au milieu du domaine de calcul est égal à :

$$c \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_j = c \frac{U_{j+1} - U_{j-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2),$$

alors qu'au bord la même méthode donne :

$$c \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_N = c \frac{U_N - U_{N-1}}{h} + \mathcal{O}(h).$$

Ainsi, on voit que l'ordre de convergence se dégrade au bord, ce qui va diminuer la précision globale de la solution. Pour qu'un schéma maintienne globalement son ordre s de convergence, les opérateurs

calculés aux bords ne doivent pas être d'un ordre inférieur strictement à $s - 1$ [?]. On comprend, dès lors, qu'il peut y avoir un problème potentiel avec les schémas de Taylor-Galerkin.

Termes de bord pour les dérivées secondes

Les dérivées secondes calculées avec l'opérateur de diffusion 2Δ , obtenu à partir de la méthode de Galerkin, sont utilisées pour déterminer les termes de diffusion numérique des méthodes Lax-Wendroff et Taylor-Galerkin, ainsi que les termes visqueux. L'opérateur présente deux parties, comme on l'a vu pour les équations (4.75) et (4.87), issues d'une intégration par parties. Le terme impliquant le bord du domaine Ω est nul partout, sauf aux frontières $\partial\Omega$. Jusqu'alors, on l'a ignoré et considéré nul. Ici, on va expliciter son calcul. Pour un noeud j situé au bord, l'équation (4.100) devient :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}^V|_j &\approx \frac{1}{V_j} \int_{\partial\Omega} \vec{\mathcal{F}}_h^V \cdot \vec{n} \phi_j dS - \frac{1}{V_j} \int_{\Omega} \vec{\mathcal{F}}_h^V \cdot \vec{\nabla} \phi_j dV \\ &= \underbrace{\frac{1}{V_j} \int_{\partial\mathcal{C}_j \cap \partial\Omega} \vec{\mathcal{F}}_h^V \cdot \vec{n} \phi_j dS}_{\text{terme de bord}} + \frac{1}{V_j} \int_{\partial\mathcal{C}_j} \vec{\mathcal{F}}_h^V \cdot \vec{n} dS \end{aligned} \quad (4.133)$$

Le terme de bord de l'équation (4.133) est une manière naturelle d'introduire les conditions limites pour l'opérateur de diffusion "physique". En effet, si la valeur de la variable calculée est connue (condition de Dirichlet), alors le terme de bord est nul, sinon il s'agit d'une condition de type flux (Neumann) et $\vec{\mathcal{F}}_h^V$ est remplacé par la condition limite du problème, dans le calcul de l'intégrale.

Les problèmes apparaissent avec les schémas LW, ETG et TTG. Leur développement analytique fait aussi apparaître les termes de bord (voir équation (4.87)). Il s'agit de schémas numériques pour la convection, dans lesquels on a introduit des termes de diffusion (à partir des dérivées temporelles d'ordre supérieur ou égal à deux - voir par exemple l'équation (4.19)). Or, ceci change la nature de l'équation à résoudre : on passe alors d'un problème hyperbolique à un problème parabolique nécessitant donc plus de conditions limites. Cela peut se traduire par un paradoxe parfois difficile à gérer dans le cas des équations d'Euler : l'équation aux différences demande alors **plus de conditions limites** que le problème mathématique originel ! On étudiera l'influence du terme de bord dans le chapitre 6. Pour ce faire, on introduit ici de nouvelles notations et dénominations pour les termes de bord :

Si on reprend l'équation (4.87), on peut écrire :

$$\begin{aligned} \mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n) &= \oint_{\partial\Omega} \phi_j \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h \right)^n \cdot \vec{n} dS - \int_{\Omega} \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h \right)^n \cdot \vec{\nabla} \phi_j dV \\ &= \mathbf{BT}_j(\mathbf{U}_h^n) + \mathbf{LL}_j^0(\mathbf{U}_h^n) \end{aligned} \quad (4.134)$$

En développant le premier terme de (4.134), on obtient :

$$\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}_h^n) \approx \sum_{e \in \mathcal{T}_h} \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h \right)_{\partial K_e}^n \cdot \int_{\partial\Omega \cap \partial K_e} \phi_j \vec{n} dS \quad (4.135)$$

$$= \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{1}{n_v^{e,ff}} \left(\vec{\mathcal{A}} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h \right)_{\partial K_e}^n \cdot \vec{S}_e^{ff} \quad (4.136)$$

où l'exposant ff indique la face de la cellule K_e située sur la frontière $\partial\Omega$. Pour simplifier le calcul de $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}^n)$, on a considéré $\left(\vec{\mathcal{A}} \cdot \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h\right)_{\partial K_e}^n$ constant sur ∂K_e .

Comme ce terme est issu de la méthode numérique, il n'y a pas de condition limite physique qui permette de fixer une valeur à $\left(\vec{\mathcal{A}} \cdot \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{F}}_h\right)_{\partial K_e}^n$ qui est un terme provenant d'une dérivée du second ordre. Les équations d'Euler n'ont pas besoin de conditions limites de ce type. Pourtant, il faut bien fixer une valeur à ce terme. Afin de la choisir et de voir si ce terme a une réelle influence, deux formulations ont été testées et étudiées pendant cette thèse :

- Formulation USOT (pour *Un-cancelled second order term*) : elle consiste à considérer que $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}_h^n) = 0$ et donc à ne calculer que $\mathbf{LL}_j^0(\mathbf{U}_h^n)$ pour le noeud j du bord.
- Formulation CSOT (pour *Cancelled second order term*) : le terme de bord $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}_h^n)$ est calculé de manière à annuler toute la contribution $\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n)$ au noeud de bord j . Cela revient à écrire : $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}_h^n) = -\mathbf{LL}_j^0(\mathbf{U}_h^n)$. La conséquence, pour le noeud j , est de supprimer toute la contribution $\mathbf{LL}_j(\mathbf{U}_h^n)$. Il ne reste plus au bord que $\mathbf{L}_j(\mathbf{U}_h^n)$.

4.12.2 Conditions limites

Introduction

Les conditions limites permettent de fermer un problème mathématique en spécifiant les valeurs que doivent prendre la solution et/ou ses dérivées aux frontières du domaine de calcul [?]. La qualité de la solution dépend donc directement du choix de celles-ci, quel que soit le phénomène étudié. Dans un code résolvant les équations de Navier-Stokes pour des fluides compressibles, ce point est d'autant plus crucial, du fait de l'acoustique. Les conditions doivent alors respecter un cahier des charges particulièrement vaste [?] :

- Imposer les valeurs cibles du problème pour toutes les grandeurs (vitesses, pression, température ou flux d'espèce, de chaleur) aux entrées-sorties du domaine.
- reproduire correctement l'acoustique : impédances nulles aux murs, réflexions totales ou partielles aux entrées ou aux sorties.
- modéliser la présence d'une couche limite, là où la résolution ne permet pas de simuler les détails de l'écoulement.

Pour ce faire, il existe différents types de conditions limites dans AVBP qu'on présente dans ce qui suit. On rappelle (pour un schéma numérique à 1 étape temporelle, par simplicité²⁰) qu'on peut écrire la mise à jour temporelle, en tout point, de la manière suivante dans AVBP :

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \mathbf{N}_j \Delta t \quad (4.137)$$

Aux noeuds du bord, les valeurs prédites par le schéma numérique doivent être corrigées pour tenir compte des conditions limites. La procédure est la suivante :

- Les mises à jour temporelles (ou résidus au noeud) sont calculées pour **tous** les noeuds du maillage, y compris ceux du bords. On obtient alors le résidu au noeud suivant : $\mathbf{N}_j^{(p)}$ avec (p) pour "prédit" (par le schéma).

²⁰La procédure est exactement la même en multi-étapes car on impose les conditions limites à chaque sous-étape [?, ?]

- Pour les noeuds du bord, les mises à jour sont ensuite corrigées, de manière à imposer les conditions limites de la façon désirée. On a alors : $\mathbf{N}_j^{(c)}$ avec (c) pour "corrigé" (par les conditions limites).
- On utilise enfin l'équation (4.137) avec $\mathbf{N}_j^{(c)}$ pour les noeuds du bord, afin de calculer les variables au temps $n + 1$

Il reste à déterminer la manière dont la correction de la mise à jour nodale est réalisée. Il existe plusieurs façons différentes de procéder à son calcul :

- **Conditions limites "classiques"**
- **Conditions limites caractéristiques**
- **Lois de paroi**

Conditions de type Dirichlet et Neumann

Etant donné qu'AVBP résout les équations des écoulements compressibles et l'importance de l'acoustique (et donc des réflexions aux entrées/sortie du domaine), la seule condition limite de ce type utilisée dans les calculs de cette thèse, modélise "les murs adiabatiques glissants" et impose :

- *Flux de chaleur et d'espèces nuls (condition de Neumann)* : compte tenu de la construction des schémas numériques utilisés dans AVBP, ces conditions sont naturellement imposées pendant le calcul de prédiction de $\mathbf{N}_j^{(p)}$ en remplaçant la partie normale des flux $\vec{\mathcal{F}}_j^n \cdot \vec{n}_j$ par les flux imposés par la condition limite, c'est-à-dire zéro ici. Ces flux corrigés sont ensuite utilisés dans le calcul des divergences.
- *Vitesse normale nulle* :

$$(\vec{u} \cdot \vec{n})^{(c)} = 0$$

- Pour le reste des grandeurs, on garde les valeurs prédites par le schéma (en tenant compte du fait que la vitesse normale est nulle), soit :

$$(\rho Y_k)^{(c)} = (\rho Y_k)^{(p)} \quad (\rho Y_k)^{(c)} = (\rho Y_k)^{(p)} \quad (\rho E)^{(c)} = (\rho E)^{(p)} - (\rho e_{c,\vec{n}})^{(p)}$$

Les mises à jour au bord sont donc corrigées de façon à prendre en compte les modifications imposées par la condition limite. Comme on le verra par la suite, cette condition limite, pourtant utilisée dans la vaste majorité des codes de calcul industriels ou de recherche, peut rendre instable un calcul.

Il convient ici de préciser que les conditions limites pour la phase dispersée sont imposées de la même manière. Lorsqu'il s'agit d'une entrée, toutes les grandeurs sont imposées (et donc les valeurs prédites sont écrasées). Pour une sortie, on garde les valeurs prédites par les schémas.

Conditions limites par décomposition en ondes caractéristiques

Les conditions limites caractéristiques (notées *ECBC*) ont été tout d'abord décrites par Thompson, [?, ?] puis généralisées aux équations de Navier-Stokes par Poinso et Lele [?] (*NSCBC*). Ces développements ont ensuite été étendus par Baum et al. [?] aux écoulements multi-espèces, pour permettre l'étude des écoulements réactifs, puis adaptés par Moureau et al. dans AVBP[?]. Un des domaines principaux d'application des conditions caractéristiques est l'aéro-acoustique [?, ?, ?] On notera qu'il existe, en outre, des adaptations pour une intégration temporelle implicite [?] et que des améliorations ont été proposées, pour tenir compte des effets tangentiels, visqueux ou dus aux termes sources [?]. Enfin, Nicoud [?] fait une comparaison entre différentes formulations des conditions caractéristiques, dont on parlera par la suite.

Principe Le principe des conditions limites caractéristiques est le suivant : les ondes sortant du domaine sont calculées correctement (elles contiennent l'information provenant de l'amont, dans le domaine de calcul) et ne doivent pas être modifiées. En revanche, les ondes arrivant de l'extérieur du domaine (et contenant une information venant de l'aval) ne sont pas calculées par le schéma numérique et doivent être fournies par l'utilisateur. Les valeurs fournies par celui-ci sont les conditions limites, dites *physiques*.

La description des conditions limites qui suit s'inspire du manuel d'AVBP et de [?].

Construction de la condition limite La mise à jour temporelle explicite du schéma numérique s'écrit ²¹ :

$$\partial \mathbf{U} = \mathbf{U}^{(p)} - \mathbf{U}^n = -\mathbf{N}^{(p)} \Delta t \quad (4.138)$$

Le résidu au noeud $\mathbf{N}_j^{(p)}$ peut être décomposé en deux parties :

$$\partial \mathbf{U} = -\Delta t \left(\mathbf{N}^{(p,CL)} + \mathbf{N}^{(p,u)} \right) \quad (4.139)$$

$\mathbf{N}_j^{(p,CL)}$ est la partie corrigée par le traitement de la condition limite et $\mathbf{N}_j^{(p,u)}$ n'est pas modifiée. Le but du traitement de la condition limite est de construire la valeur de la solution \mathbf{U} au temps $n + 1$.

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n - \Delta t (\mathbf{N}^{(c,CL)} + \mathbf{N}^{(p,u)}) \quad (4.140)$$

où $\mathbf{N}^{(c,CL)}$ est la partie du résidu qui a été corrigée et qui dépend de $\mathbf{N}^{(p,u)}$, de \mathbf{U}^n , du type de condition limite choisie, ainsi que des valeurs cibles fournies par l'utilisateur. La correction est calculée de la manière suivante :

$$\mathbf{N}^{(c,CL)} = \mathbf{N}^{(p,CL)} - \mathbf{N}^{(p,in)} + \mathbf{N}^{(c,in)} \quad (4.141)$$

ce qui signifie qu'on enlève la partie "fausse" du résidu notée $\mathbf{N}^{(p,in)}$ (ondes entrantes) et qu'on la remplace par une contribution calculée par les conditions limites $\mathbf{N}^{(c,in)}$. Il reste à faire le choix de la partie du résidu à modifier $\mathbf{N}^{(p,CL)}$.

Dans AVBP, il existe deux méthodes pour modifier $\mathbf{N}^{(p,CL)}$ et obtenir $\mathbf{N}^{(c,CL)}$: la première est basée sur une formulation spatiale et la seconde réside sur une interprétation temporelle. Il existe toutefois d'autres stratégies comme :

- Modification des termes d'advection dans les équations bicaractéristiques [?]
- Décomposition de Fourier des équations d'Euler linéarisées aux bords [?]
- Prise en compte des termes visqueux et des termes sources [?]
- Décomposition entre une partie convective et une partie acoustique pour construire les ondes [?]

On ne les présentera pas ici puisqu'elles ne sont pas utilisées à l'heure actuelle dans le code. Des détails et comparaisons de ces méthodes peuvent être trouvés dans [?, ?]

Formulation spatiale Il s'agit de la forme initiale de la méthode NSCBC de Poinot et Lele [?], la variation des grandeurs caractéristiques \mathbf{W} ²² est exprimée grâce aux gradients de celles-ci :

$$\partial \mathbf{W} = -\underline{\mathbf{A}} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial n} \Delta t \quad (4.142)$$

²¹ On s'affranchira de l'indice spatial j dans cette partie pour alléger les notations.

²² La grandeur $\partial \mathbf{W}$ est souvent nommée *strength*.

où $\mathbf{\Lambda}$ est la matrice diagonale $m \times m$ contenant les valeurs propres (donc les vitesses de propagation des ondes) de la matrice $\vec{\mathcal{A}} \cdot \vec{n}$, où \vec{n} est choisi orthogonal aux frontières du domaine Ω . L'équation (4.142) signifie que la variation des grandeurs caractéristiques est proportionnelle aux gradients normaux de ces variables. On introduit, à la manière de Poinot et Lele [?], la notation \mathcal{L} telle que :

$$\mathcal{L} = \underline{\mathbf{\Lambda}} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial n} \quad (4.143)$$

Le lecteur peut se référer à [?, ?, ?] pour plus de détails concernant la méthode NSCBC et les relations entre les différentes variations $\partial \mathbf{U}$, $\partial \mathbf{W}$, figurent dans ces manuscrits les tenseurs Jacobiens des flux.

Pour construire la condition limite, comme on l'a décrite précédemment, il faut obtenir les variations $\partial \mathbf{W}$ à partir du résidu prédit $\mathbf{N}^{(p)}$. Ce calcul est réalisé en utilisant l'approche du *résidu normal* (*normal residual approach*). Ceci correspond à la méthode NSCBC [?] dans laquelle les dérivées spatiales normales à la frontière sont utilisées pour corriger le résidu $\mathbf{N}^{(p,CL)}$. Pour ce faire, le résidu prédit $\mathbf{N}^{(p)}$ est décomposé en deux parties :

$$\mathbf{N}^{(p)} = \overbrace{\mathbf{N}_n^{(p)}}^{\text{partie normale}} + \overbrace{\mathbf{N}_t^{(p)} + \mathbf{N}_{Diffusion}^{(p)} + \mathbf{N}_{Sources}^{(p)}}^{\text{partie non-normale}} \quad (4.144)$$

La formulation NSCBC stipule que seule la partie normale doit être modifiée, ce qui s'écrit :

$$\mathbf{N}^{(p,CL)} = \mathbf{N}_n^{(p)}, \quad (4.145)$$

ce qui implique que :

$$\mathbf{N}^{(p,u)} = \mathbf{N}_t^{(p)} + \mathbf{N}_{Diffusion}^{(p)} + \mathbf{N}_{Sources}^{(p)} \quad (4.146)$$

La partie normale du résidu peut être définie de la manière suivante :

$$\mathbf{N}_n^{(p)} = \underline{\mathbf{E}}_{\mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial n} \quad (4.147)$$

où $\underline{\mathbf{E}}_{\mathbf{U}} = \underline{\mathbf{A}}_{\mathbf{U}} n_x + \underline{\mathbf{B}}_{\mathbf{U}} n_y + \underline{\mathbf{C}}_{\mathbf{U}} n_z = \vec{\mathcal{A}} \cdot \vec{n}$ est la matrice Jacobienne (des variables conservatives) normale. En réalisant une décomposition classique en ondes ([?, ?]), on a :

$$\underline{\mathbf{E}}_{\mathbf{U}} = \underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U}} \underline{\mathbf{\Lambda}} \underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}} \quad (4.148)$$

$\underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U}}$ est la matrice contenant les vecteurs propres à droite (vecteurs-colonnes) et $\underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}}$ les vecteurs propres à gauche (vecteurs-lignes) de $\underline{\mathbf{E}}_{\mathbf{U}}$. Les valeurs prédites pour la variation des grandeurs caractéristiques s'écrivent :

$$\partial \mathbf{W}^{(p)} = +\underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}} \partial \mathbf{U}^{(p)} = -\underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}} \underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U}} \underline{\mathbf{\Lambda}} \underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}^{(p)}}{\partial n} \Delta t = -\underline{\mathbf{\Lambda}} \underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}^{(p)}}{\partial n} \Delta t \quad (4.149)$$

La variation des variables caractéristiques est, de ce fait, calculée en utilisant les dérivées normales des variables conservatives. Les conditions limites permettent d'exprimer les ondes entrantes $\mathbf{W}^{(in)}$ et la solution est ensuite, de nouveau, réécrite en fonction des grandeurs conservatives et incluse au résidu (Eq.(4.141)).

$$\mathbf{N}^{(c,CL)} \Delta t = (\mathbf{N}^{(p,CL)} - \mathbf{N}^{(p,in)} + \mathbf{N}^{(c,in)}) \Delta t \quad (4.150)$$

$$= (\underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U}} \partial \mathbf{W}^{(p)} - \underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U}} \partial \mathbf{W}^{(p,in)} + \underline{\mathbf{R}}_{\mathbf{U}} \partial \mathbf{W}^{(c,in)}) \Delta t \quad (4.151)$$

La mise à jour s'écrit finalement :

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n - \mathbf{N}^{(c,CL)} \Delta t - \left[\mathbf{N}_t^{(p)} + \mathbf{N}_{Diffusion}^{(p)} + \mathbf{N}_{Sources}^{(p)} \right] \Delta t$$

On notera, tout de même, que le calcul des ondes entrantes ne tient pas compte des termes tangentiels, visqueux et chimiques. Certaines méthodes récentes [?, ?] incluent ces termes dans le calcul des ondes, ce qui permet dans certains cas des améliorations significatives.

O. Colin a développé, dans sa thèse [?], une alternative pour calculer la partie normale du résidu . L'idée est d'écrire le résidu normal en soustrayant la partie tangentielle au résidu prédit total :

$$\mathbf{N}^{(p,CL)} = \mathbf{N}_n^{(p)} = \mathbf{N}^{(p)} - \mathbf{N}_t^{(p)} \quad (4.152)$$

La partie tangentielle est, en effet, *a priori* mieux calculée car utilisant plus de noeuds (schéma centré) que la partie normale (schéma décentré).

Formulation temporelle La formulation originelle introduite par Thompson [?] est basée sur des variations temporelles et non spatiales comme précédemment.

$$\partial \mathbf{W} = \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} \Delta t \quad (4.153)$$

Les variations des variables caractéristiques sont donc déterminées à partir d'une variation temporelle des variables primitives (ou conservatives). Leur calcul est réalisé selon l'approche du résidu total (*full residual*). Cela signifie que les modifications dues aux conditions limites se font sur $\mathbf{N}^{(p)}$ et non $\mathbf{N}_n^{(p)}$. Par conséquent, la partie non modifiée du résidu est nulle, ce qui donne : $\mathbf{N}^{(p,CL)} = \mathbf{N}^{(p)}$ et : $\mathbf{N}^{(p,u)} = \mathbf{0}$. Ici, seul le résidu $\mathbf{N}^{(p)}$ est utilisé. Les gradients normaux n'interviennent donc pas dans le calcul des ondes. On a donc :

$$\partial \mathbf{W}^{(p)} = \underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}} \partial \mathbf{U} = -\underline{\mathbf{L}}_{\mathbf{U}} \mathbf{N}^{(p)} \Delta t \quad (4.154)$$

Comme dans le cas de la formulation spatiale, les ondes sortant du domaine ne sont pas modifiées, alors que les ondes entrantes sont corrigées. Une fois le résidu modifié, on obtient, comme pour la formulation spatiale, la relation suivante :

$$\mathbf{N}^{(c,CL)} \Delta t = (\mathbf{N}^{(p,CL)} - \mathbf{N}^{(p,in)} + \mathbf{N}^{(c,in)}) \Delta t \quad (4.155)$$

La mise à jour temporelle s'écrit alors :

$$\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n - \mathbf{N}^{(c,CL)} \Delta t \quad (4.156)$$

Lois de parois

L'un des points faibles de la LES à l'heure actuelle concerne le traitement de l'écoulement proche parois [?, ?, ?]. En effet, la résolution nécessaire pour décrire les mécanismes se produisant dans la couche limite turbulente rendrait les calculs beaucoup trop coûteux. La solution adoptée et implantée dans AVBP est l'utilisation d'une loi de paroi logarithmique pour la vitesse, afin de prédire correctement le frottement. Ce choix a été fait pour sa relative simplicité et son faible coût de calcul en comparaison

avec d'autres modèles plus perfectionnés. On rappelle ici brièvement les principes de la loi de paroi pour des murs adiabatiques (seules conditions de ce type utilisée dans cette thèse). Pour plus de détails, le lecteur peut se référer à [?].

Il faut rappeler que la méthode numérique utilisée dans AVBP est une formulation *cell-vertex*. Par conséquent, toutes les données (donc la vitesse, la température...) sont disponibles à la paroi et peuvent être imposées, au même titre que le frottement. Toutefois, fixer la vitesse à zéro à la paroi (en plus d'imposer le gradient) serait beaucoup trop contraignant, dans le calcul et conduirait à des oscillations non physiques. Le choix est donc de laisser libre la vitesse, en considérant que le premier point de calcul se trouve déjà dans le fluide, à une distance δ_c suffisamment petite pour ne pas la considérer dans le calcul de y_w (qui correspond à la distance entre le deuxième point de calcul et la paroi).

Afin de pouvoir utiliser cette condition limite de loi de paroi, certains pré-requis doivent être respectés : la résolution doit être suffisamment lâche pour inclure les structures turbulentes qu'on rencontre près des murs et l'hypothèse doit être applicable (pas de décollement de la couche limite...). L'algorithme relatif à la condition limite est alors le suivant [?] :

Etape	Description
1	Calcul de u_τ grâce aux Eqs.(4.158) ou (4.159) et (4.157). Les valeurs d'entrée sont la vitesse au deuxième point de calcul u_2 , la viscosité à la paroi : $\nu = \nu(T_1)$ et la distance à la paroi : $y_w = \Delta y$.
2	Calcul du frottement pariétal τ_w , via l'équation (4.160) et $\rho = \rho_1$.
3	Application de τ_w et $q_w = 0$ et avancer en temps les équations.
4	Enlever la composante normale à la paroi de la vitesse \vec{u}_1 puis retour à l'étape 1.

TAB. 4.4 - Algorithme de calcul de la condition limite de loi de paroi pour un mur adiabatique

On rappelle les définitions classiques des grandeurs utilisées pour le fonctionnement de cette condition limite. Les deux grandeurs adimensionnées principales sont données par :

$$y^+ = \frac{y u_\tau}{\nu} \quad (4.157)$$

$$u^+ = y^+ \quad \text{si } y^+ \leq 11,445 \quad (4.158)$$

$$u^+ = \kappa^{-1} \ln(E y^+) \quad \text{si } y^+ > 11,445 \quad (4.159)$$

avec $\kappa = 0.41$ la constante de Von Karman et $E = 9.2$, une constante d'intégration (toutes deux déterminées expérimentalement). La loi (4.158) correspond à la loi linéaire et la loi (4.159) est la loi logarithmique. Le frottement pariétal s'écrit :

$$\tau_w = \rho u_\tau^2 \quad (4.160)$$

Chapitre 5

Analyse de stabilité théorique et pratique des schémas de convection d'AVBP sur des cas tests académiques - domaine périodique

Introduction

On va désormais caractériser les performances des différents schémas numériques de convection présentés dans le chapitre 4. Ici, l'étude des discrétisations est faite dans un domaine périodique car on s'intéresse d'abord au comportement du code "au milieu" du domaine de calcul. Le traitement des bords sera évoqué au chapitre 6.

Pour ce faire, on s'appuie principalement sur **l'équation de convection linéaire à coefficients constants**, qu'on rappelle :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{c} \cdot \vec{\nabla} u = 0, \quad (5.1)$$

et qu'on étudie sur des domaines mono- et bidimensionnels. On choisit (5.1), car elle représente la description la plus simple du transport d'une grandeur et ses discrétisations sont assez simples à formuler. Comme le souligne Sengupta [?], l'étude de (5.1) est **nécessaire**, la plupart du temps, pour comprendre, quantifier et anticiper les erreurs introduites par les opérateurs discrets, connaître la précision du résultat obtenu et s'assurer de la stabilité de la méthode choisie. Hélas, si ces renseignements sont précieux, ils ne sont **pas** toujours **suffisants**. Vérifier qu'un schéma numérique permet de résoudre correctement cette équation d'onde est primordial, mais n'implique pas automatiquement qu'il se comportera de manière satisfaisante dans le cas des équations de Navier-Stokes.

Nous rappelons, dans un premier temps, quelques notations utiles (soit courantes dans la littérature, soit inspirées du travail de Vichnevetsky [?]), afin d'introduire les discrétisations présentées chapitre 4

dans les cas mono- et bidimensionnels sur des maillages réguliers. On utilise les méthodes de Von Neumann et de l'équation résolue appliquées à ces schémas numériques, afin de rappeler des résultats connus (différences centrées, Lax-Wendroff) et en présenter d'autres, mettant en avant la supériorité des schémas Taylor-Galerkin et justifiant le choix des méthodes adoptées dans AVBP pour la résolution des SGE. Des cas tests permettent, en outre, de confirmer les résultats analytiques.

5.1 Présentation du problème et notations

On étudie l'équation de convection linéaire et le système des équations d'Euler linéarisées pour un écoulement isentropique, qu'on explicitera plus tard. On se place dans un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ avec d , le nombre de dimensions spatiales. La définition de Ω est la suivante :

$$\begin{cases} d = 1 & : \quad \Omega = (0, 1) \\ d = 2 & : \quad \Omega = (0, 1) \times (0, 1) \end{cases}$$

Le domaine $\Omega \times \mathbb{R}^+$ est discrétisé de manière régulière dans chaque dimension en introduisant un pas d'espace $h = 1/N$ avec $N \in \mathbb{N}_*$ et un pas de temps Δt strictement positifs. Les noeuds du maillage (spatio-temporel) s'écrivent donc :

$$\begin{cases} d = 1 & : \quad (x_j, t^n) = (jh, n\Delta t) \\ d = 2 & : \quad (x_j, y_l, t^n) = (jh, lh, n\Delta t) \end{cases}$$

On présente les notations utilisées pour le cas $d = 1$. Les solutions au noeud (x_j, t^n) s'écrivent : $u(x_j, t^n) = u_j^n$, tandis que la solution numérique donnée par le système discrétisé est notée : U_j^n . Pour l'étude, on associera le vecteur solution $(U_j^n)_{0 \leq j \leq N}$ à une fonction constante par morceaux avec $U^n(x) = U_j^n \quad \forall x \in]x_j - \frac{h}{2}, x_j + \frac{h}{2}[$. On notera l'erreur au noeud (x_j, t^n) : $\epsilon_j^n = u_j^n - U_j^n$. On introduit de plus les opérateurs suivants :

- E : opérateur de décalage spatial, tel que $U_{j+1}^n = EU_j^n$.
- Z : opérateur de décalage temporel, tel que $U_j^{n+1} = ZU_j^n$.
- $\Delta_0 = \frac{1}{2}(E - E^{-1})$: opérateur de différences centrées permettant de discrétiser les dérivées spatiales d'ordre 1 et tel que : $\Delta_0 U_j = \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_j h + \mathcal{O}(h^3)$.
- $\delta^2 = (E - 2 + E^{-1})$: opérateur de différences centrées permettant de discrétiser les dérivées spatiales d'ordre 2 et tel que : $\delta^2 U_j = \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_j h^2 + \mathcal{O}(h^4)$.
- $M = \frac{1}{6}(E + 4 - E^{-1})$ l'opérateur "matrice de masse", pour les méthodes éléments finis.
- $\nu = \frac{c\Delta t}{h}$: nombre CFL, comme on l'a introduit dans le chapitre 4.

5.2 Analyse spectrale et équation résolue - étude monodimensionnelle

5.2.1 Quelques définitions

On va tout d'abord faire des rappels sur les outils d'analyse numérique [?, ?, ?, ?] permettant de décrire en détails les performances des schémas numériques utilisés dans cette thèse. En considérant les notations précédentes, on va écrire les discrétisations totales disponibles dans AVBP. La forme générale des schémas sera exprimée de la façon suivante :

$$U_j^{n+1} = H(\Delta t, A, Z) U_j^n \quad (5.2)$$

où H est la méthode d'avancement en temps et A est l'opérateur de semi-discrétisation spatiale de l'équation (5.1) tel que :

$$\frac{dU_j}{dt} = -AU_j, \quad (5.3)$$

ce qui donne sous forme matricielle (en reprenant les notations du chapitre 4 :

$$\frac{d\{U\}}{dt} = -[A]\{U\} \quad (5.4)$$

Si on se réfère au chapitre précédent, on a ici $N_j = AU_j$, ce qui correspond au résidu écrit au noeud j . On rappelle que la discrétisation temporelle est de type Euler ou Runge-Kutta. La formulation en trois étapes à faible stockage s'écrit :

$$H(\Delta t, A, Z) = \sum_{m=0}^3 \frac{(-\Delta t, A)^m}{m!} \quad (5.5)$$

Erreur de troncature

Elle permet d'étudier la consistance d'un schéma numérique *au sens des différences finies*. La consistance permet de vérifier que le problème discrétisé tend vers le problème continu, lorsque h et Δt tendent vers zéro. L'erreur de troncature permet en outre, et c'est ce qui nous intéresse le plus ici, d'évaluer la précision du schéma [?]. Pour définir l'erreur de troncature, on utilise deux nouvelles notations :

$$\mathcal{L} := \frac{\partial}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial x} \quad (5.6)$$

est l'opérateur correspondant l'équation (5.1) et donc : $\mathcal{L}(u) = 0$. En utilisant (5.2), sa discrétisation s'écrit :

$$L_{h,\Delta t}(U_j^n) = U_j^{n+1} - H(\Delta t, A, Z)U_j^n = 0. \quad (5.7)$$

L'erreur de troncature s'écrit alors :

$$\mathcal{L}(u(x_j, t^n)) - L_{h,\Delta t}(u(x_j, t^n)) = ET_{h,\Delta t} \quad (5.8)$$

Concrètement, elle se calcule en injectant la solution exacte u dans l'opérateur aux différences approximant \mathcal{L} , puis en remplaçant les opérateurs discrets par des séries de Taylor, en espace et en temps, de la solution autour de (x_j, t^n) . Cela nécessite donc que **la solution soit suffisamment régulière** en (x_j, t^n) . On dira que le schéma numérique est précis à l'ordre p en espace et q en temps, si on a :

$$ET_{h,\Delta t} = \mathcal{O}(h^p) + \mathcal{O}(\Delta t^q)$$

Un calcul d'erreur "expérimental" (via une simulation numérique) devra donc se faire en s'assurant, au préalable, que la solution initiale est suffisamment régulière (d'où le choix classique d'une gaussienne). La condition de consistance, au sens des différences finies, est que $ET_{h,\Delta t}$ tende vers zéro quand h et Δt tendent vers zéro.

Stabilité

Une propriété importante pour un schéma est sa stabilité. Elle assure qu'on obtient la solution au problème discrétisé, qu'on cherche à résoudre. Un schéma instable provoque en général l'arrêt du calcul, à cause de la divergence des résultats obtenus. Au sens des différences finies, un schéma est stable s'il existe une constante strictement positive K , indépendante des pas d'espace et de temps h et Δt , telle que pour tout $n \geq 0$:

$$\|U^n\| \leq K \|U^0\|$$

où $\|\cdot\|$ est une norme qu'on peut définir de la manière suivante (pour $d = 1$) :

$$\|U^n\|_p = \left(\sum_{j=0}^N h |U_j^n|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad 1 \leq p \leq +\infty \quad (5.9)$$

et qu'on appelle norme L^p (voir discussion p.39 [?]). Pour $p = +\infty$, on a :

$$\|U^n\|_\infty = \max_{j=0,\dots,N} |U_j^n| \quad (5.10)$$

Notion de convergence La convergence de la méthode discrète signifie que la solution qu'on obtient en résolvant l'équation aux différences (5.7), tend vers la solution exacte de l'équation différentielle (5.1) quand h et Δt tendent vers zéro.

D'après le **théorème de Lax**, un schéma converge vers la solution de l'équation différentielle qu'il approxime si et seulement s'il est stable et consistant. On peut donc écrire :

$$\boxed{\text{CONSISTANCE}} + \boxed{\text{STABILITE}} = \boxed{\text{CONVERGENCE}}$$

Cette définition est valable, non seulement pour les différences finies, mais aussi pour les volumes et les éléments finis. Les définitions de consistance et de stabilité sont alors différentes (voir par exemple

l'équation (4.4)) [?, ?, ?]. Cependant, par la suite, nous serons principalement intéressés par la stabilité en norme L^2 , la dissipation, la diffusion et la précision des schémas. Pour notre cas d'étude dans ce chapitre (convection linéaire sur maillage régulier), on pourra traiter les schémas numériques avec les définitions présentées précédemment et traiter toutes les équations aux différences obtenues de la même manière (qu'elles soient issues des différences, volumes ou éléments finis) ¹

5.2.2 Analyse de Fourier et méthode de Von Neumann

On suppose désormais qu'on se situe sur un **domaine monodimensionnel périodique de longueur unité**². Dès lors on a :

$$u(x + 1, t) = u(x, t) \quad \forall t > 0$$

et donc :

$$U_0^n = U_N^n \quad \forall n > 0$$

Les fonctions u et U sont donc périodiques et peuvent donc s'écrire sous la forme de séries de Fourier [?], au temps $t = t^n$. On a par exemple (attention, ici la longueur du domaine est 1 donc elle n'apparaît pas !) :

$$U_j^n = \sum_{p \in \mathbb{Z}} \hat{U}^n(p) e^{2i\pi p x_j} \quad (5.11)$$

et \hat{U} est le coefficient de Fourier en espace défini ici par :

$$\hat{U}^n(p) = \int_0^1 U(x, t^n) e^{-2i\pi p x} dx \quad (5.12)$$

On introduit le nombre d'onde : $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ et $\lambda = \frac{1}{p}$ la longueur d'onde. D'après le critère de Nyquist, on a : $\lambda \in [2h, Nh]$ (et il y a aussi l'harmonique $p = 0$ qui représente la solution constante).

Solution exacte

Avant d'utiliser l'analyse de Fourier, on rappelle que la solution de l'équation (5.1) est illustrée par la figure (5.1). La solution à un instant t est donnée par la translation de la solution initiale d'une distance $d = c t$ car on peut écrire : $u(x, t) = u(x - ct, 0) = u_0(x - ct)$.

Si on fait abstraction des sommes (ce qui revient à étudier la solution harmonique par harmonique³) et qu'on utilise \hat{U} dans (5.1), on peut écrire que pour tout k :

$$\frac{\partial \hat{u}}{\partial t} + i k c \hat{u} = 0 \quad (5.13)$$

¹ On a déjà démontré dans le chapitre précédent que les schémas d'AVBP sont construits pour être consistants aux sens des volumes finis et conservatifs, on ne reviendra pas sur ces notions ici.

² Comme le souligne certains auteurs [?], on peut très bien faire l'analyse qui suit dans \mathbb{R} au lieu de $[0, 1]$, en remplaçant les séries de Fourier par des intégrales. Les conclusions obtenues sont les mêmes dans un cas comme l'autre.

³ L'étude de l'erreur, harmonique par harmonique et qui aboutit aux mêmes résultats, est appelée méthode de Von Neumann[?]

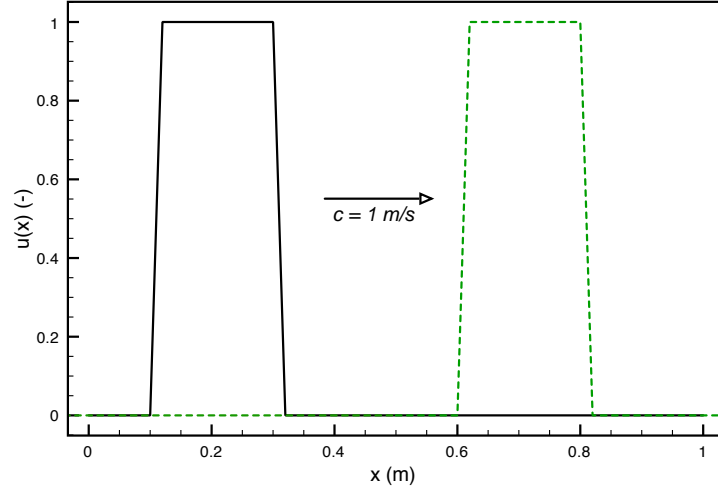


FIG. 5.1 - Transport d'une onde en créneau. La solution en trait pointillé est obtenue après $t = 0.5s$. On note que le profil initial en trait plein a été translaté à la vitesse c .

La solution de (5.13) est : $\hat{u}(k, t) = \hat{u}(k, 0)e^{-ikct}$. Et on peut donc écrire :

$$\frac{\hat{u}(k, t + \Delta t)}{\hat{u}(k, t)} = \exp(-ikc\Delta t) \quad (5.14)$$

ce qui correspond à une convection parfaite à la vitesse c , comme prévu.

Solution avec une semi-discrétisation spatiale - Dissipation et dispersion

Si on reprend la semi-discrétisation (5.3)-(5.4) après application de la transformée de Fourier, on a :

$$\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} + \hat{A} \hat{U} = 0, \quad (5.15)$$

alors la solution est : $\hat{U}(k, t) = \hat{U}(k, 0)e^{-\Re(\hat{A})t}e^{-i\Im(\hat{A})t}$ et donc [?] :

$$\frac{\hat{U}(k, t + \Delta t)}{\hat{U}(k, t)} = \exp(-\Re(\hat{A})\Delta t) \exp(-i\Im(\hat{A})\Delta t) \quad (5.16)$$

Si A est antisymétrique alors la partie réelle de \hat{A} est nulle et la semi-discrétisation est dite non dissipative et conservative au sens de l'énergie (l'amplitude de \hat{U} est constante au cours du temps). Sinon elle est soit **diffusive** ou **dissipative** ($\Re(\hat{A}) > 0$), soit instable ($\Re(\hat{A}) < 0$). La phénomène de dissipation est illustré par la figure 5.2.

La relation de dispersion exacte de l'équation (5.3) est :

$$\boxed{\omega = \Omega(k) = kc} \quad (5.17)$$

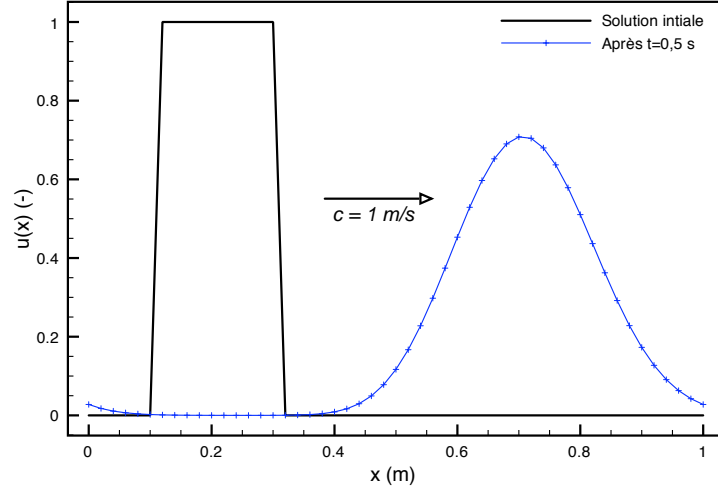


FIG. 5.2 - Mise en évidence de la diffusion (ou dissipation) sur le transport d'une onde en créneau. L'amplitude de l'onde est moins élevée qu'à l'instant initial et les gradients se sont fortement adoucis.

et ω est la pulsation temporelle. La vitesse de phase des ondes est donnée par la relation $c_\phi = \frac{\Omega(k)}{k} = c$ et la vitesse de groupe, correspondant à la vitesse de propagation de l'énergie est : $\mathcal{V}_g = \frac{d\Omega(k)}{dk} = c$ [?]. Celles-ci sont égales et constantes donc les ondes-solutions sont non-dispersives.

La semi-discrétisation (5.3) ne permet pas de retrouver exactement $\Omega(k)$, c_ϕ et \mathcal{V}_g . Que la discrétisation soit spatiale ou totale, on peut alors introduire la relation de dispersion d'un schéma numérique [?, ?, ?] :

$$\omega^* = \Omega^*(k) = k c^*(k) = k^*(k) c \quad (5.18)$$

où ω^* , c^* et k^* sont les pulsations, vitesse de phase et nombre d'onde **modifiés**, relatifs au schéma numérique. En utilisant (5.13), (5.15), (5.17) et (5.18), on peut réécrire la relation de dispersion du schéma numérique :

$$\frac{d\hat{U}}{dt} = -i\omega^*\hat{U} = -\hat{A}(k)\hat{U} \quad \text{donc} \quad \omega^* = -i\hat{A}(k)$$

ω^* , k^* et c^* sont des fonctions de k . De plus, ce sont des **grandeurs complexes**, contrairement à ω , k et c qu'on écrira par la suite :

$$\begin{aligned} \omega^* &= \omega_R^* + i \omega_I^* \\ k^* &= k_R^* + i k_I^* \\ c^* &= c_R^* + i c_I^* \end{aligned}$$

En tenant compte de leur lien avec \hat{A} et de l'équation (5.16), on peut expliciter le rôle des parties réelles et imaginaires. Les parties réelles ω_R^* , k_R^* et c_R^* sont équivalentes aux grandeurs physiques auxquelles elles correspondent. Ainsi une oscillation de nombre d'onde k_0 aura une vitesse de phase $c_R^*(k_0)$ dans la simulation. Les parties imaginaires ne sont pas liées au phénomène de propagation de l'oscillation mais à son amplification (dans un cas instable) ou son amortissement (à l'instar du rôle que jouerait une

viscosité). Si $c_I^*(k_0)$ est positive alors l'oscillation est amplifiée.

Si la vitesse de phase c_R^* n'est pas constante en fonction de k , alors les ondes-solutions sont **dispersives** car elles ne se déplacent pas toutes à la même vitesse. Une des conséquences de la dispersion est l'apparition de différentes sortes d'ondulations non physiques (*wiggles*) dans la simulation (voir figure 5.3).

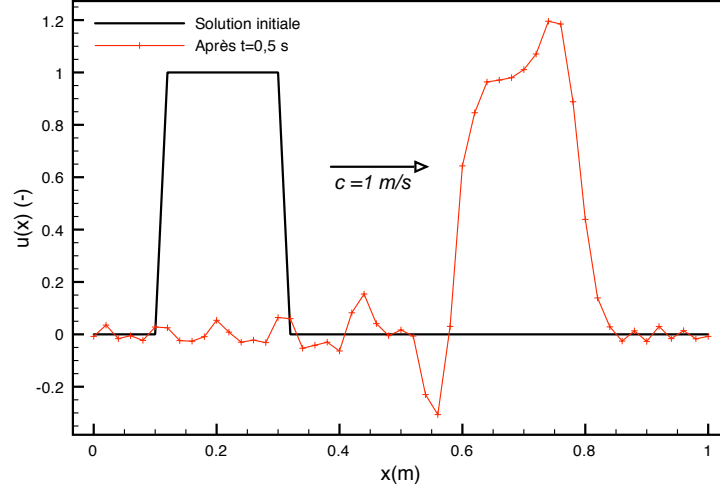


FIG. 5.3 - Mise en évidence de la dispersion sur le transport d'une onde en créneau. Les harmoniques du signal initial ne sont pas toutes transportées à la même vitesse, ce qui fait apparaître des oscillations numériques (*wiggles* ou *ripples*).

Solution avec une discrétisation totale - coefficient d'amplification

On va désormais étudier le cas d'une discrétisation totale et on introduit une notation supplémentaire : $\xi = kh$. En effet, si l'intérêt de la section 5.2.2 est de mettre en évidence les erreurs introduites par les opérateurs spatiaux, la discrétisation temporelle détériore elle aussi la solution et il faut donc aussi la considérer. On utilise l'expression (5.2) à laquelle on applique la transformée de Fourier. On définit alors le coefficient d'amplification :

$$G(k) = \frac{\hat{U}^{n+1}}{\hat{U}^n} = |G(k)| e^{i\phi_G} \quad (5.19)$$

où ϕ_G est l'argument ou phase de G . Par analogie avec les relations (5.14) et (5.16) et en utilisant l'expression (5.18), on peut écrire :

$$G(k) = e^{-ikc^* \Delta t} = e^{-i\omega^* \Delta t} = \underbrace{e^{\omega_I^* \Delta t}}_{\text{module}} \underbrace{e^{-i\omega_R^* \Delta t}}_{\text{phase}} \quad (5.20)$$

ce qui permet de dire que le module du coefficient d'amplification (ou la partie imaginaire de la pulsation) permet de mesurer la dissipation. On va donc chercher à vérifier la **condition de stabilité de Von Neumann**, i.e avoir $|G|$ toujours inférieur ou égal à 1⁴. A partir de l'équation (5.20), on peut écrire la

⁴Dans le cas d'une équation avec terme source, la condition sur $|G|$ est moins restrictive [?] et peut être $|G| \leq 1 + \mathcal{O}(\Delta t)$

relation de dispersion du schéma numérique faisant intervenir le coefficient d'amplification :

$$\omega^* = \Omega^*(k) = -\frac{1}{i\Delta t} \ln G(k) \quad (5.21)$$

L'argument de G permet d'écrire : $\phi_G = -\omega_R^* \Delta t$. De plus, en utilisant les relations (5.18), (5.19) et (5.20), on peut exprimer la vitesse de phase de schéma numérique :

$$\frac{c_R^*}{c} = -\frac{\phi_G}{kc\Delta t} = -\frac{\phi_G}{\nu kh} = -\frac{\phi_G}{\nu \xi} \quad (5.22)$$

où $\nu = c\Delta t/h$ est le CFL. La partie réelle du nombre d'onde est la suivante :

$$k_R^* = -\frac{\phi_G}{\nu h} \quad (5.23)$$

Celle-ci permet d'introduire la vitesse de groupe relative au schéma numérique [?] :

$$\mathcal{V}_g^* = \Re \left\{ \frac{d\Omega^*(k)}{dk} \right\} = c \frac{dk_R^*}{dk} = -\frac{c}{\nu} \frac{d\phi_G}{dkh} = -\frac{c}{\nu} \frac{d\phi_G}{d\xi} \quad (5.24)$$

Les expressions (5.22) et (5.23) seront utilisées pour montrer les effets dispersifs des schémas. Il faut bien rappeler qu'ici c^* , k^* et ω^* sont complexes. En effet, on a : $\omega^* = \omega_R^* + i \omega_I^*$ et la pulsation temporelle d'une oscillation de nombre d'onde k_0 dans un calcul est fournie par la partie réelle $\omega_R^*(k_0)$ (la partie imaginaire étant le taux d'amplification). Une grandeur importante dans la simulation est le nombre d'onde k_c associé à la fréquence de coupure ω_c du schéma, c'est-à-dire la fréquence maximale temporelle qui peut exister dans la simulation numérique (conditions limites mises à part). Pour plus de détails concernant cette grandeur, on renvoie le lecteur aux travaux de Vichnevetsky et Bowles [?] ainsi qu'à la thèse de doctorat de Baum [?]. A l'aide de transformées de Fourier en temps (et non plus en espace), ils caractérisent la transformée de Fourier de l'opérateur E pour plusieurs schémas semi-discrets. Ils mettent ainsi en évidence l'existence de deux types d'ondes-solutions pouvant exister dans la simulation (appelées physiques ou "p" et numériques ou "q") pour une pulsation donnée. Ceci permet de mettre en évidence la fréquence de coupure, ainsi que les conséquences que peut engendrer l'utilisation d'une condition limite "pulsant" à une fréquence supérieure à la fréquence de coupure.

Une définition du nombre d'onde de coupure est aussi donnée par Sengupta [?]. Celui-ci correspond à la valeur maximale que peut avoir k^* , soit :

$$k_c = \max_{0 \leq k \leq \pi} k^* \quad (5.25)$$

dans le cas d'un schéma semi-discret centré, ce qui correspond aussi à une vitesse de groupe nulle. On utilisera cette définition pour des discrétisations totales, avec k_R^* en lieu et place de k^* .

La condition de Von Neumann permet de garantir la stabilité en norme L^2 , la plus importante d'un point de vue pratique, puisqu'elle permet de garantir que la solution reste à "énergie finie". On peut montrer [?] que si $|G(k)| \leq 1 \quad \forall k$ (dans le cas de l'équation de convection) alors le schéma est stable

en norme L^2 (utilisation de la relation de Parseval).

Aliasing - Dissipation au sens de Kreiss

Comme on l'a mentionné précédemment, l'étude de l'équation de convection linéaire s'avère nécessaire pour étudier les caractéristiques des schémas numériques, notamment la précision et la stabilité. Toutefois, elle ne s'avère plus suffisante en général, dès lors que l'équation devient non linéaire. Il existe, en effet, un phénomène appelé *aliasing* [?, ?] dû à la multiplication des variables entre elles. D'après le critère de Nyquist, on ne peut représenter de longueur d'onde plus petite que $2h$, soit $-\pi \leq kh \leq \pi$. Or, en prenant l'exemple du produit de deux variables discrètes U_j et V_j (on fait abstraction de l'exposant temporel), on obtient :

$$\begin{aligned} U_j V_j &= \sum_{p_1} \hat{U}(p_1) e^{2i\pi p_1 x_j} \sum_{p_2} \hat{V}(p_2) e^{2i\pi p_2 x_j} \\ &= \sum_{p_1} \hat{U}(p_1) \left(\sum_{p_2} \hat{V}(p_2) e^{2i\pi p_2 x_j} \right) e^{2i\pi p_1 x_j} \\ &= \sum_{p_1} \sum_{p_2} \hat{U}(p_1) \hat{V}(p_2) e^{2i\pi (p_1 + p_2) x_j} \end{aligned} \quad (5.26)$$

et on a : $|2\pi p_1 x_j| \leq \pi$ et $|2\pi p_2 x_j| \leq \pi$. On voit apparaître des termes en $2\pi(p_1 + p_2)x_j$ et on peut donc avoir $|2\pi(p_1 + p_2)x_j| > \pi$. Ces composantes ne peuvent donc pas être représentées comme des harmoniques ayant des longueurs d'onde inférieures à $2h$. Compte tenu des relations de trigonométrie, elles sont donc représentées comme des harmoniques ayant pour phase $2\pi(1 - (p_1 + p_2)x_j)$ (donc de longueurs d'onde supérieures à $2h$), ce qui signifie que leur énergie a été transférée à d'autres longueurs d'onde (de plus basse fréquence), de manière non physique.

La conséquence est le transfert d'énergie de certains harmoniques à d'autres et notamment des plus petites longueurs d'onde (généralement d'origine non physique - *wiggles*) aux plus grandes. Le résultat peut s'avérer catastrophique et la méthode numérique peut diverger alors même qu'elle est censée être stable d'après l'étude linéaire. Un exemple souvent fourni est le schéma Leap-frog couplé à un schéma centré. Celui-ci, marginalement stable (non dissipatif), devient très instable, dès lors qu'il est utilisé pour simuler des phénomènes non linéaires sans ajout de dissipation artificielle.

Certaines discrétisations (comme les schémas *skew-symmetric* [?]) permettent d'éliminer ce phénomène mais au prix de certaines concessions qui, dans notre cas, ne sont pas acceptables (trop coûteuses ou perte de la conservativité...). L'autre méthodologie, souvent adoptée, est d'être suffisamment dissipatif au sens de Kreiss (la difficulté est de définir le 'suffisamment'). La viscosité artificielle d'ordre 4 est souvent utilisée dans cette optique. La définition de la dissipation de Kreiss est donnée dans [?] :

Définition Un schéma est dissipatif (au sens de Kreiss) d'ordre $2s$, où $s \in \mathbb{N}_*$, s'il existe une constante $\delta > 0$ telle que pour tout vecteur d'onde \vec{k} (avec $k_x h_x, k_y h_y, k_z h_z \leq \pi$), les valeurs propres λ de la matrice d'amplification (NB : qu'on définira plus tard) satisfassent la condition :

$$|\lambda(\vec{x}, \Delta t, \vec{k})| \leq 1 - \delta |\vec{k} \cdot \vec{h}|^{2s}.$$

Cette définition, comme le rappelle Hirsch [?] est une manière de vérifier que, pour $kh = \pi$, le schéma applique une quantité suffisante de dissipation pour éviter tout problème lié aux petites longueurs d'onde, ce qu'on vérifiera pour les schémas d'AVBP.

5.2.3 Méthode de l'équation modifiée ou résolue

Il existe une autre méthode permettant d'étudier les caractéristiques de schémas numériques, ainsi que leurs conditions de stabilité. Elle a été introduite par Warming et Hyett [?] et des travaux, afin de l'améliorer, ont été effectués par Chang [?] et Carpentier [?]. On va rappeler, en outre, le lien fort qui existe entre cette formulation et la méthode de Von Neumann.

Principe

On a montré que résoudre l'équation aux différences (5.7) revient à résoudre, de façon exacte (ici on ne compte pas les erreurs d'arrondis), l'équation :

$$L_{h,\Delta t}(u) = 0 \quad \implies \quad \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = ET_{h,\Delta t} \quad (5.27)$$

Pour pouvoir comparer les schémas entre eux, déterminer leur domaine de stabilité et mettre en avant les erreurs de dissipation et de dispersion, on peut avoir recours à la méthode de Warming et Hyett [?] qui consiste à éliminer toutes les dérivées temporelles de (5.27) (à l'exception de la dérivée du premier ordre) par des dérivées spatiales, en utilisant cette même équation (5.27). Une fois cette *équation modifiée*, on obtient une erreur de troncature ne dépendant plus que de dérivées spatiales et de h (Δt est "caché" dans le CFL ν), ce qui permet de déterminer :

- l'ordre de précision spatial réel du schéma
- les erreurs de diffusion induites par le schéma (dérivées d'ordre pair)
- les erreurs de dispersion (dérivées impaires)
- la stabilité du schéma (les coefficients des dérivées paires doivent être alternativement positifs ou négatifs, une dérivée seconde, s'il y en a une, devant avoir un coefficient positif).

Les erreurs de dispersion et de dissipation sont en particulier bien mises en évidence, lorsqu'on compare l'équation modifiée obtenue à des modèles classiques, bien référencés dans la littérature. Ainsi la semi-discrétisation d'ordre 2 centrée en espace (Δ_0) aura une erreur de troncature de la forme $Ch^2 u_{xxxx} + o(h^2)$ (les dérivées d'ordres impairs supérieurs sont non nulles mais négligeables, au moins pour les grandes longueurs d'onde). Le comportement de la solution obtenue est donc très comparable à celui de la solution de l'équation de Korteweg-deVries linéaire (voir [?]), c'est-à-dire très dispersif.

Comme le soulignent Donea et al. [?], cette méthodologie a été développée pour les schémas aux différences finies mais peut être utilisée pour des équations aux différences obtenues via les méthodes des volumes ou des éléments finis. C'est donc ce qu'on va faire. D'un point de vue pratique cependant, la méthodologie est très fastidieuse, dès que le schéma étudié est d'ordre élevé (c'est le cas des schémas TTG), multi-étapes (c'est encore le cas des schémas TTG) et implicite (c'est le cas des schémas TTG en espace). C'est pourquoi, on procède d'une autre façon, en faisant intervenir le coefficient d'amplification d'une manière similaire à Hirsch [?] ou encore Carpentier [?]. On note finalement, que bien qu'elle soit compliquée à mettre en place, la construction classique de l'équation modifiée a toutefois un avantage, comparée à l'écriture du coefficient d'amplification : elle n'est pas limitée aux problèmes linéaires.

Lien avec le coefficient d'amplification

L'équation modifiée peut s'écrire sous la forme :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = \sum_{p=1}^{+\infty} \left[a_{2p} h^{2p-1} \frac{\partial^{2p} u}{\partial x^{2p}} + a_{2p+1} h^{2p} \frac{\partial^{2p+1} u}{\partial x^{2p+1}} \right] \quad (5.28)$$

et le schéma est d'ordre s quand le premier coefficient est proportionnel h^s [?].

En appliquant la transformée de Fourier à (5.28) et en écrivant la solution de l'équation obtenue, on peut exprimer son coefficient d'amplification (rapport entre la solution à $t = (n+1)\Delta t$ et la solution à $t = n\Delta t$). On a donc $G = f(k, \nu, a_2, a_3, a_4, \dots)$. En utilisant de plus l'expression (5.20), on peut exprimer la pulsation modifiée ω^* , puis la vitesse de phase modifiée c^* en fonction des coefficients a_{2p} et a_{2p+1} de l'erreur de troncature. On obtient, après calcul :

$$c^* = c + \sum_{p=1}^{+\infty} \left[i a_{2p} (-1)^p (kh)^{2p-1} + a_{2p+1} (-1)^{p+1} (kh)^{2p} \right] \quad (5.29)$$

$$= c - i a_2 \xi + a_3 \xi^2 + i a_4 \xi^3 - a_5 \xi^4 + \dots \quad (5.30)$$

On relie c^* quand ξ tend vers zéro aux coefficients de l'erreur de troncature et donc la précision du schéma numérique étudié. Dès lors, on utilisera des développements limités de c^* , autour de $\xi = 0$, **obtenu à partir de G** , pour déterminer les premiers termes de l'équation modifiée.

5.2.4 Application aux schémas d'AVBP

On applique désormais les méthodes vues précédemment aux schémas numériques utilisés dans AVBP. A titre d'indication, les erreurs de troncature associées au schéma aux différences centrées de référence Δ_0 et aux éléments finis de Galerkin (schémas semi-discrets spatiaux) sont [?] :

$$ET_{h,\Delta t}^{\Delta_0} = -\frac{1}{6} c h^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \mathcal{O}(h^4) \quad (5.31)$$

$$ET_{h,\Delta t}^{Galerkin} = \frac{1}{180} c h^4 \frac{\partial^5 u}{\partial x^5} + \mathcal{O}(h^6) \quad (5.32)$$

Lax-Wendroff (LW)

On commence l'analyse avec le schéma LW⁵ car les résultats pour ce schéma sont bien connus [?] et peuvent servir d'illustrations.

Le schéma LW s'écrit de la façon suivante :

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \nu \Delta_0 U_j^n + \frac{1}{2} \nu^2 \delta^2 U_j^n \quad (5.33)$$

En appliquant la méthode de Von Neumann, on obtient :

$$G_{LW}(k) = 1 - i\nu \sin(kh) - \nu^2(1 - \cos(kh)) \quad (5.34)$$

Ce qui permet d'écrire la relation de dispersion pour le schéma LW, lorsque $k \rightarrow 0$:

$$\Omega_{LW}^*(k) = kc - \frac{ch^2}{6}(1 - \nu^2)k^3 - i \frac{ch^3}{8}\nu(1 - \nu^2)k^4 + \mathcal{O}(k^5) \quad (5.35)$$

On en déduit l'erreur de troncature et donc l'équation résolue, lorsque le schéma LW est utilisé :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{ch^2}{6}(1 - \nu^2) \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} - \frac{ch^3}{8}\nu(1 - \nu^2) \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \mathcal{O}(h^4) \quad (5.36)$$

De par sa construction, on sait que le schéma de LW est d'ordre 2 en temps, l'erreur de troncature montre qu'il est aussi d'ordre 2 en espace. Une propriété intéressante est que la discrétisation devient 'parfaite' pour $\nu = 1$. En pratique, on ne peut utiliser cette caractéristique (les erreurs d'arrondis provoqueraient la divergence du calcul), mais il convient toutefois de l'indiquer.

Schéma Runge-Kutta 3 - différences centrées (RK3-CV)

Sur un maillage régulier monodimensionnel, le schéma *cell-vertex* "de base" devient la discrétisation centrée d'ordre 2 classique (opérateur Δ_0), à l'instar de tous les volumes finis centrés en espace. Celle-ci est souvent étudiée dans la littérature [?, ?]. Son symbole \hat{A} étant purement imaginaire, elle est non dissipative, mais en revanche est très dispersive pour les petites longueurs d'onde. Utilisée avec la méthode de Runge-Kutta à 3 étapes comme dans AVBP, la discrétisation totale est la suivante :

$$U_j^{n+1} = \sum_{m=0}^3 \frac{(-\nu \Delta_0)^m}{m!} U_j^n \quad (5.37)$$

$$= U_j^n - \nu \Delta_0 U_j^n + \frac{1}{2} \nu^2 (\Delta_0)^2 U_j^n - \frac{1}{6} \nu^3 (\Delta_0)^3 U_j^n \quad (5.38)$$

⁵le schéma *cell-vertex* sur maillage monodimensionnel régulier est équivalent au schéma classique obtenu avec la méthode des différences finies

Le coefficient d'amplification de la méthode (5.37) est le suivant :

$$G_{RK3CV}(k) = 1 - i\nu \sin(kh) - \frac{1}{2}\nu^2 \sin^2(kh) - i\frac{1}{6}\nu^3 \sin^3(kh) \quad (5.39)$$

donc :

$$\Omega_{RK3CV}^*(k) = kc - \frac{ch^2}{6} k^3 - i \frac{ch^3}{24} \nu^3 k^4 + \mathcal{O}(k^5) \quad (5.40)$$

ce qui donne pour l'équation résolue :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{ch^2}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} - \frac{ch^3}{24} \nu^3 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \mathcal{O}(h^4) \quad (5.41)$$

Ce schéma est par construction d'ordre 3 en temps et l'équation (5.41) indique qu'il est d'ordre 2 en espace. Par ailleurs, on note que l'erreur de dispersion d'ordre 3 ne dépend pas du pas de temps choisi (pas de dépendance en CFL).

Schéma Euler-Taylor-Galerkin (ETG)

L'expression du schéma ETG en 1D sur un maillage régulier fait intervenir une matrice de masse M et s'écrit :

$$U_j^{n+1} = U_j^n - M_{ETG}^{-1} \left(\nu \Delta_0 U_j^n + \frac{1}{2} \nu^2 \delta^2 U_j^n \right) \quad (5.42)$$

et : $M_{ETG} = M - \frac{1}{6} \nu^2 \delta^2$. La présence de M_{ETG}^{-1} rappelle qu'il s'agit d'un schéma implicite. Le coefficient d'amplification du schéma est donc le suivant :

$$G_{ETG}(k) = 1 - \left(i\nu \sin(kh) + 2\nu^2 \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) \right) \left(1 - \frac{2}{3}(1 - \nu^2) \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) \right)^{-1} \quad (5.43)$$

La relation de dispersion pour le schéma ETG s'écrit :

$$\Omega_{ETG}^*(k) = kc - i \frac{ch^3}{24} \nu(1 - \nu^2) k^4 - \frac{ch^4}{180} (4\nu^4 - 5\nu^2 + 1) k^5 + \mathcal{O}(k^5) \quad (5.44)$$

et l'équation résolue avec le schéma ETG est la suivante :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = -\frac{ch^3}{24} \nu(1 - \nu^2) \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{ch^4}{180} (4\nu^4 - 5\nu^2 + 1) \frac{\partial^5 u}{\partial x^5} + \mathcal{O}(h^5) \quad (5.45)$$

Clairement, on obtient une nette amélioration par rapport au schéma Lax-Wendroff. En effet, l'erreur de dispersion d'ordre 3 a disparu. Le schéma est donc précis à l'ordre 3 en espace et en temps. Il a, de plus, la même propriété que le schéma Lax-Wendroff à CFL unitaire.

Schémas TTG

Les schémas TTG s'expriment en deux étapes. Sur un maillage monodimensionnel régulier, on les écrit :

$$\tilde{U}_j^n = U_j^n - M^{-1} \left(\alpha \nu \Delta_0 U_j^n - \beta \nu^2 \delta^2 U_j^n \right) \quad (5.46)$$

$$U_j^{n+1} = U_j^n - M^{-1} \left(\nu (\theta_1 \Delta_0 U_j^n + \theta_2 \Delta_0 \tilde{U}_j^n) - \nu^2 (\epsilon_1 \delta^2 U_j^n + \epsilon_2 \delta^2 \tilde{U}_j^n) \right) \quad (5.47)$$

Ces schémas étant à 2 étapes, on va donc aussi écrire deux coefficients d'amplification, le second étant le coefficient global et étant fonction du premier.

$$\tilde{G}_{TTG}(k) = 1 - \left(i \alpha \nu \sin(kh) + 4\beta \nu^2 \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) \right) \left(1 - \frac{2}{3} \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) \right)^{-1} \quad (5.48)$$

$$\begin{aligned} G_{TTG}(k) &= 1 - \left[i \nu \left(\theta_1 \sin(kh) + \theta_2 \sin(kh) \tilde{G}(k) \right) \right. \\ &\quad \left. - \nu^2 \left(4\epsilon_1 \nu^2 \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) + 4\epsilon_2 \nu^2 \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) \tilde{G}(k) \right) \right] \left(1 - \frac{2}{3} \sin^2\left(\frac{kh}{2}\right) \right)^{-1} \end{aligned} \quad (5.49)$$

On peut désormais écrire les relations de dispersion correspondant aux schémas codés dans AVBP.

$$\Omega_{TTG3}^*(k) = kc - i \frac{ch^3}{72} \nu (3 - \nu^2) k^4 - \frac{ch^4}{180} (4\nu^4 - 5\nu^2 + 1) k^5 + \mathcal{O}(k^5) \quad (5.50)$$

$$\Omega_{TTG4A}^*(k) = kc - i \frac{ch^3}{24} \nu k^4 - \frac{ch^4}{360} (3\nu^4 - 10\nu^2 + 2) k^5 + \mathcal{O}(k^5) \quad (5.51)$$

$$\begin{aligned} \Omega_{TTGC(\gamma)}^*(k) &= kc - i \frac{ch^3}{24} \nu (\nu^2 - 2\gamma) k^4 \\ &\quad + \frac{ch^4}{360} (12\nu^4 + (30\gamma - 5)\nu^2 - 2) k^5 + \mathcal{O}(k^5) \end{aligned} \quad (5.52)$$

et on en déduit les équations résolues par les schémas TTG⁶ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} &= -\frac{ch^3}{72} \nu (3 - \nu^2) \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \\ &\quad + \frac{ch^4}{180} (4\nu^4 - 5\nu^2 + 1) \frac{\partial^5 u}{\partial x^5} + \mathcal{O}(h^5) \quad (\text{TTG3}) \end{aligned} \quad (5.53)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} &= -\frac{ch^3}{24} \nu \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \\ &\quad + \frac{ch^4}{360} (3\nu^4 - 10\nu^2 + 2) \frac{\partial^5 u}{\partial x^5} + \mathcal{O}(h^5) \quad (\text{TTG4A}) \end{aligned} \quad (5.54)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} &= -\frac{ch^3}{24} \nu (\nu^2 - 2\gamma) \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \\ &\quad - \frac{ch^4}{360} (12\nu^4 + (30\gamma - 5)\nu^2 - 2) \frac{\partial^5 u}{\partial x^5} + \mathcal{O}(h^5) \quad (\text{TTGC}) \end{aligned} \quad (5.55)$$

⁶On rappelle que le paramètre γ pour TTGC correspond à ϵ_1 dans la formulation TTG générale.

Les schémas TTG présentés ici sont donc d'ordre 3 en espace. D'autre part, par construction, on rappelle qu'ils sont aussi d'ordre 3 en temps (sauf TTG4A qui est d'ordre 4 en temps - voir section 4.6). La caractéristique première des schémas Taylor-Galerkin (on inclut ETG ici) est bien la diminution significative de l'erreur de dispersion très présente pour les schémas d'ordre 2, tout en maintenant un niveau de dissipation numérique globalement très faible. On notera que le paramètre γ a un rôle primordial sur le comportement du schéma TTGC(γ). Le choix de γ s'est porté sur 0.01 [?]. Le schéma obtenu est très peu dissipatif. En effet, γ contrôle la dissipation. Pour une valeur de 0.5, le schéma ne dissipe quasiment pas, il devient instable si $\gamma < 0$ (le module du coefficient d'amplification devient plus grand que 1).

On va présenter les résultats obtenus à l'aide d'un code écrit afin de calculer les coefficients d'amplification présentés précédemment. Les comparaisons entre les schémas se feront à différents CFL (0.1, 0.3, 0.5 et 0.7). Dans cette section, on ne présentera les résultats que pour la partie des kh positifs ($|G|$ étant paire et ϕ_G impaire).

5.2.5 Diffusion ou Dissipation

La dissipation du schéma numérique est fournie par le module du coefficient d'amplification $|G|$ et correspond à une **erreur en amplitude**. On garde à l'esprit la notion de dissipation selon Kreiss donc pour tous les schémas, on regarde en particulier la valeur $|G(\pi)|$.

Les figures 5.4 à 5.6 indiquent la dissipation introduite par les différents schémas étudiés et la figure 5.7 présente une comparaison à un CFL donné (0.3 ici) entre tous les schémas étudiés et quelques schémas centrés de référence (différences finies explicites et compactes).

Il est clair que les schémas basés sur une discrétisation temporelle de type Taylor-Galerkin (LW, ETG, TTG3, TTG4A) sont plus dissipatifs que les autres (à l'exception de TTGC qui présente des performances très proches d'un schéma compact d'ordre 6), ce qui est attendu vu la construction de ces schémas (dérivées spatiales d'ordre 2 introduites). Pour une application comme une simulation aux grandes échelles, la question est donc de savoir si la diffusion engendrée par le schéma n'est pas trop importante et ne dégrade pas la diffusion physique (et en particulier ne dégrade pas le transfert d'énergie entre les différentes échelles de la turbulence). Sur ce point, les avis restent partagés. Dans [?], Colin et Rudgyard montrent que seul le schéma TTGC répond aux exigences d'une simulation aux grandes échelles, voire d'une simulation numérique directe. Il a été construit pour avoir les qualités des schémas Taylor-Galerkin en terme de dispersion (on le verra après), mais aussi et surtout pour dissiper beaucoup moins. En particulier les schémas LW, ETG et TTG4A s'avèrent trop dissipatifs dans des simulations directes de turbulence homogène isotrope décroissante (voir les spectres d'énergie turbulente et d'ensrophie dans [?]).

On peut contrebalancer cet argument avec plusieurs remarques :

- Le CFL de référence pour les équations de Navier-Stokes est le CFL acoustique. Or le CFL convectif est souvent 10 à 100 fois inférieur au CFL acoustique. En effet, on peut écrire le lien entre les deux CFL sur un maillage monodimensionnel régulier :

$$\nu_{acous} = \frac{(u+c)\Delta t}{h} = \frac{u\Delta t}{h} \left(1 + \frac{1}{M}\right) = \nu_{conv} \left(1 + \frac{1}{M}\right)$$

$$\Rightarrow \nu_{conv} = \underbrace{\frac{M}{M+1}}_{\sim 0.1 \text{ pour } M=0.1} \nu_{acous}$$

Pour ces valeurs, tous les schémas sont quasiment équivalents et très performants sur une grande plage de fréquence (à CFL égal à 0.1, les performances sont déjà très satisfaisantes). Donc, la dégradation du phénomène de diffusion par les schémas convectifs n'est pas aussi importante.

- Un schéma doit dissiper aux petites échelles. Or la figure 5.6 met en évidence le fait que TTGC est très peu dissipatif au sens de Kreiss car $|G(\pi)| > 0.9$ pour tous les CFL, contrairement aux autres schémas Taylor-Galerkin. Ceci explique pourquoi le schéma TTGC manque de robustesse, dès qu'il est utilisé pour des problèmes non linéaires, à l'instar de tous les schémas centrés (hors Lax-Wendroff/Taylor-Galerkin). Il nécessite alors l'utilisation de viscosité d'ordre 4, de façon quasi-systématique, avec des valeurs de $\epsilon^{(4)}$ toujours bien plus élevées que pour les autres schémas.

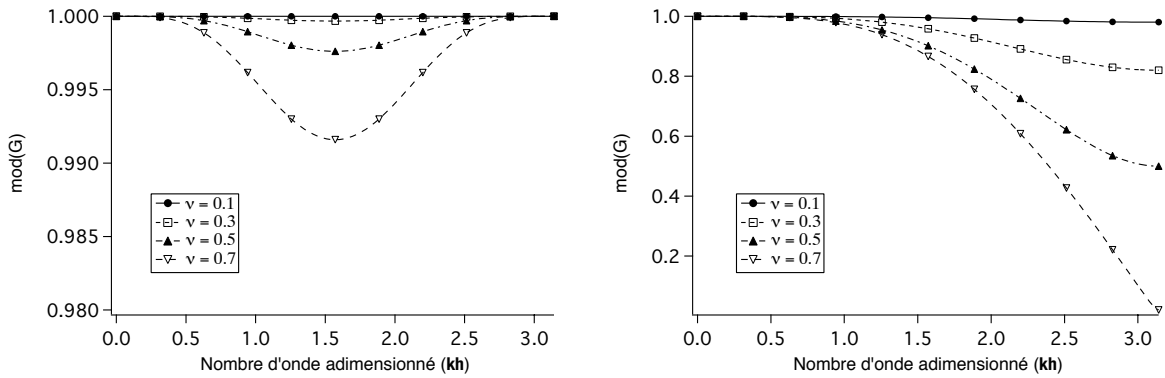


FIG. 5.4 - Dissipation numérique introduite par le schéma RK3-CV (à gauche) et le schéma LW (à droite) en fonction du nombre d'onde adimensionné pour différents CFL.

Stabilité

Bien qu'on puisse le faire de manière analytique pour les schémas les plus simples, on emploie une méthode numérique pour déterminer le critère de stabilité (nombre CFL limite) pour tous les schémas. Le principe consiste à utiliser le code de calcul qui a permis de tracer les figures précédentes ($|G|$, k^* ...) et l'utiliser pour calculer $|G|$ sur une plage de CFL suffisamment large (typiquement de 0 à 2 ou 3) et discrétisée (pas de 0.01 en général) et chercher pour chaque CFL $\max_{kh} |G|$. Dès que celui-ci dépasse 1 strictement, on connaît le CFL limite ν_c .

Le tableau 5.1 indique les domaines de stabilité pour les schémas d'AVBP.

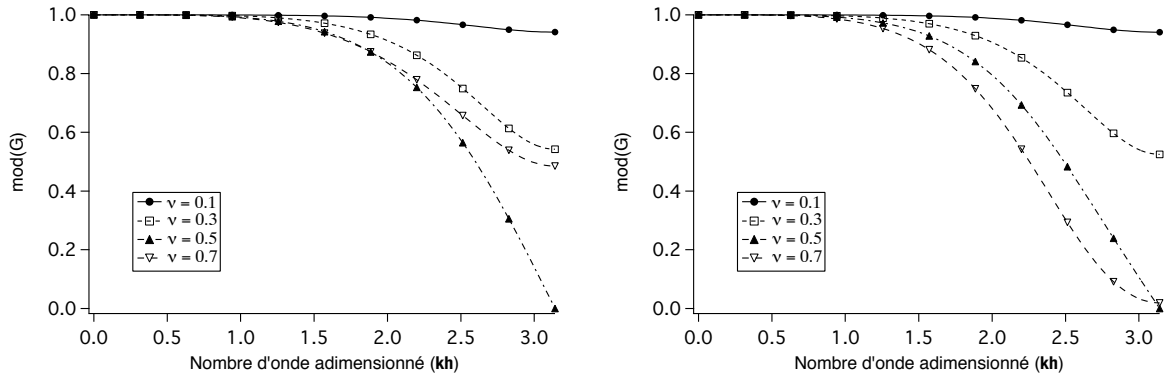


FIG. 5.5 - Dissipation numérique introduite par le schéma ETG (à gauche) et le schéma TTG3 (à droite) en fonction du nombre d'onde adimensionné pour différents CFL.

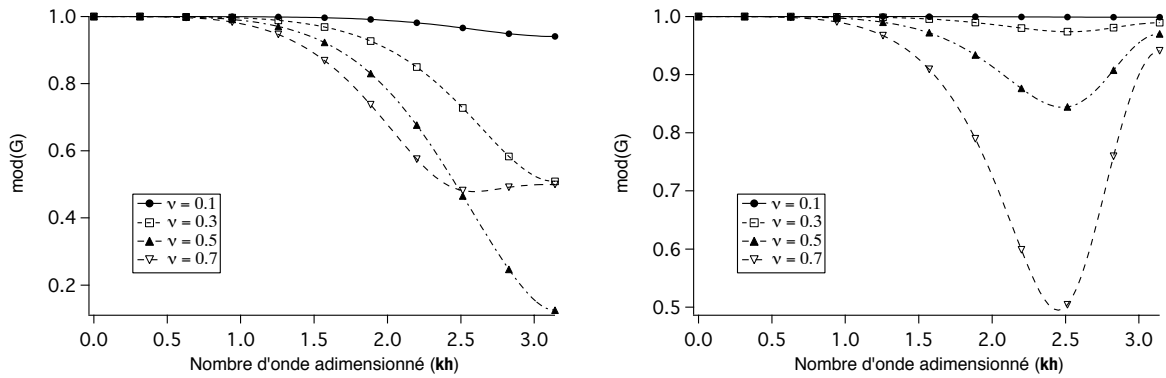


FIG. 5.6 - Dissipation numérique introduite par le schéma TTG4A (à gauche) et le schéma TTGC (à droite) en fonction du nombre d'onde adimensionné pour différents CFL.

Schéma	ν_c
RK3-CV	$\sqrt{3}$
LW	1
ETG	1
TTG3	$\sqrt{\frac{3}{4}}$
TTG4A	1
TTGC(0.01) [?]	1.022

TAB. 5.1 - Domaine de stabilité des schémas étudiés. ν_c est le CFL critique.

Dispersion

L'étude de la dispersion va permettre de s'intéresser à la vitesse de propagation des ondes et de l'énergie en fonction du nombre d'onde. L'information est fournie par la phase du coefficient d'amplification. La dispersion des ondes résulte de l'**erreur de phase** réalisée par le schéma numérique qui varie en fonction de la longueur d'onde. Les oscillations sont transportées à des vitesses erronées et surtout différentes en fonction de k , d'où la possible dispersion des différents harmoniques d'un paquet d'ondes.

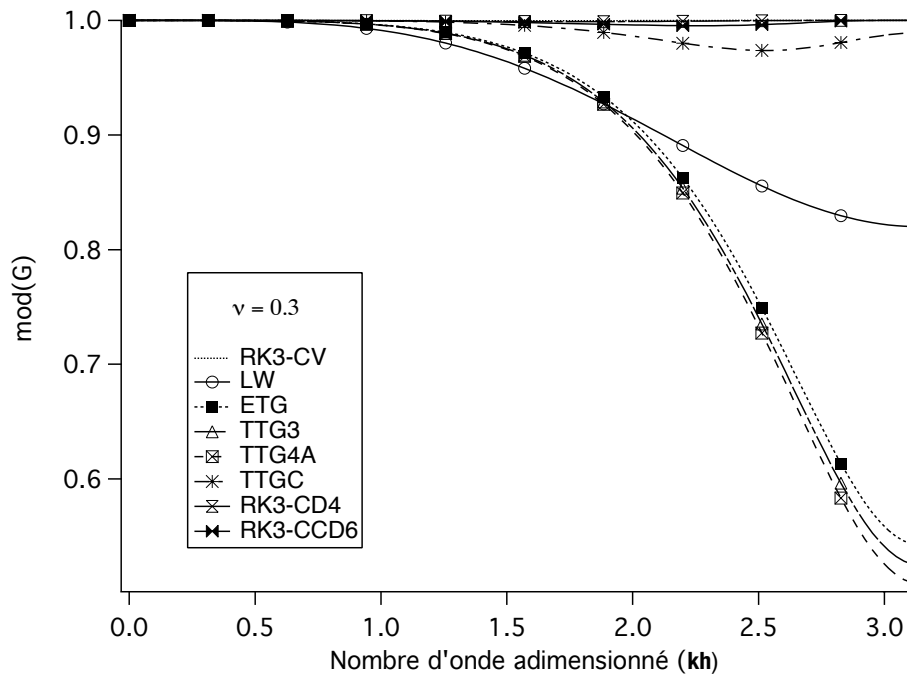


FIG. 5.7 - Comparaison de la dissipation numérique relative à différents schémas. Le CFL est égal à 0.3. Des schémas de référence comme les schémas centrés d'ordre 4 explicite et le schéma compact de Padé du 6ème ordre ont été ajoutés pour compléter la comparaison.

Vitesse de phase - Nombre d'onde modifié On peut étudier la dispersion à l'aide de la vitesse de phase et le nombre d'onde modifié⁷. A la manière de Vichnevetsky [?], Lele [?] et Sengupta [?], on choisit d'étudier la partie réelle du nombre d'onde modifié adimensionnalisé $k_R^* h$. Les figures 5.8 à 5.10 indiquent la dispersion générée par les différents schémas étudiés et la figures 5.12 présente une comparaison à un CFL donné (0.3 ici) entre tous les schémas étudiés et quelques schémas centrés de référence (différences finies explicites et compactes).

Les schémas Lax-Wendroff / Taylor-Galerkin avaient comme défaut de dissiper plus que les schémas centrés classiques. En revanche, en ce qui concerne les erreurs de dispersion, les premiers sont bien plus performants, en particulier lorsque le CFL augmente⁸. Le schéma RK3-CV a une dispersion quasi-constante par rapport au CFL (ce que laisse apparaître le terme en h^2 de son erreur de troncature, équation (5.41)). Les courbes de nombre d'onde modifié étant sous la courbe kh idéale, on en déduit que la vitesse de phase des ondes est inférieure à c (retard de phase). Concrètement, cela se traduit par l'apparition d'oscillations numériques, plus 'lentes' que les ondes physiques (et donc apparaissant dans leurs sillages). A noter, que les oscillations qu'on peut rencontrer près de discontinuités sont dues généralement au phénomène de Gibbs⁹ et non pas à la dispersion, qui peut cependant aggraver ses effets néfastes [?].

⁷Ici on parle en réalité de la partie réelle de ces grandeurs, la partie imaginaire étant relative à la dissipation.

⁸Les schémas LW et ETG ont une propriété très intéressante : à CFL unitaire, leur erreur de troncature est nulle, le schéma résout exactement l'équation (5.1)

⁹Le phénomène de Gibbs provient de la discrétisation et donc de la troncature des très hautes fréquences dans le spectre de la solution.

Le gain d'un ordre des schémas Taylor-Galerkin apparaît nettement : l'erreur principale de dispersion des schémas d'ordre 2 (dérivée d'ordre 3) a disparu, ce dont témoignent les figures 5.8 à 5.10. La résolution spectrale est en effet bien meilleure que pour RK3-CV et LW (la fonction k_R^*h approxime bien mieux la fonction kh de référence). On note, en outre, figure 5.9 que les schémas ETG et TTG3 ont une erreur de dispersion quasiment nulle à CFL égal à 0.5. TTGC étant moins dissipatif que les autres schémas de la même famille, il n'est pas étonnant de noter que son erreur de dispersion est légèrement supérieure (l'effet n'est toutefois pas très sensible en pratique).

Par ailleurs, on peut faire une remarque concernant la nature de la dispersion des ondes pour les schémas Taylor-Galerkin. On note qu'à partir d'une certaine valeur de CFL (typiquement environ 0.5 sauf pour TTGC qui change à un CFL d'environ 0.8-0.85), $k_R^* > k$. Cela signifie que les schémas sont en avance de phase et cela a une conséquence sur la nature de la propagation de l'énergie, comme on le verra après.

Enfin, en étudiant les figures 5.11 et 5.12, on note que les schémas Taylor-Galerkin ont une erreur de dispersion extrêmement proche du schéma compact d'ordre 6, ce qui met en évidence une fois encore la qualité de cette famille de schémas.

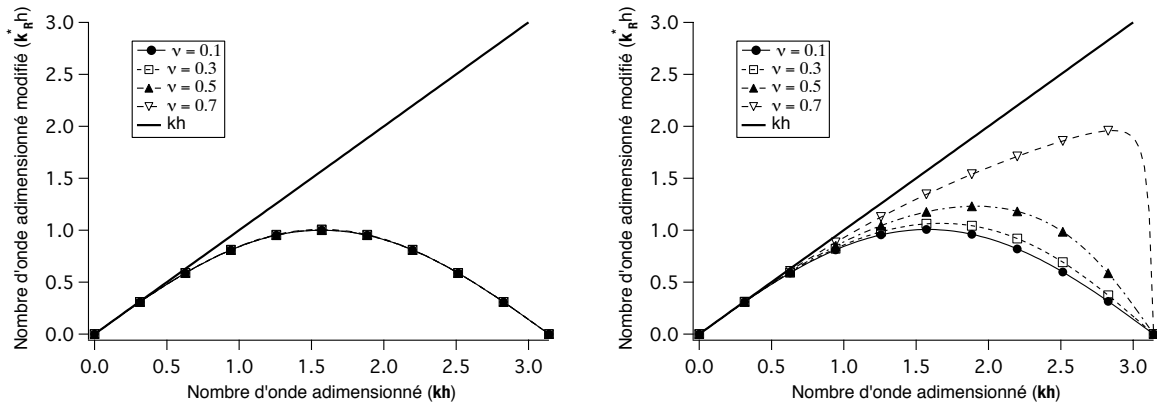


FIG. 5.8 - Parties réelles des nombres d'ondes modifiés adimensionnés des schémas RK3-CV (à gauche) et LW (à droite) en fonction du nombre d'onde adimensionné pour différents CFL.

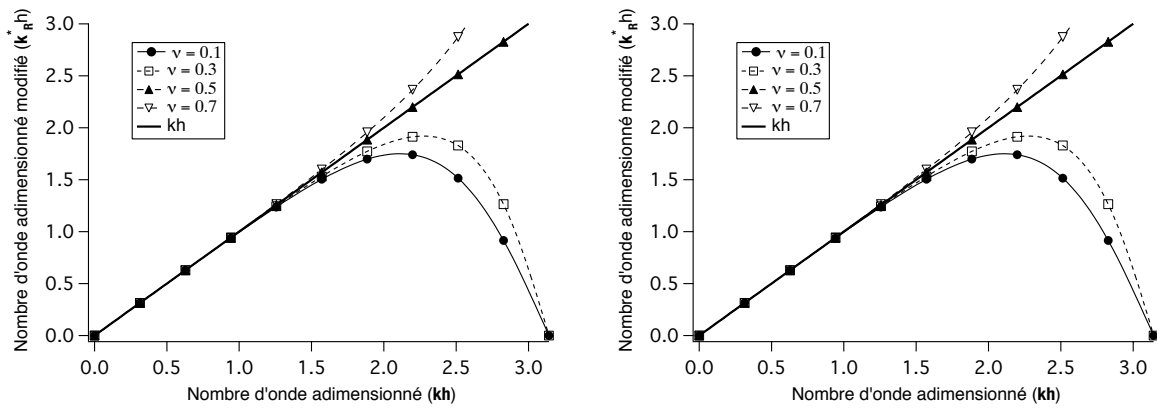


FIG. 5.9 - Parties réelles des nombres d'ondes modifiés adimensionnés des schémas ETG (à gauche) et TTG3 (à droite) en fonction du nombre d'onde adimensionné pour différents CFL.

Résolution spectrale La notion de résolution spectrale est très liée aux qualités en termes d'erreur de phase d'un schéma numérique et définit la capacité d'un schéma à résoudre correctement une grande variété d'échelles. Elle est déterminée par la valeur du nombre d'onde de coupure, non pas tel que Nyquist le définit, mais en tenant compte de $k_c = \max_k k_R^*$. Cette valeur est directement liée à la plus haute fréquence temporelle qui peut apparaître dans un calcul : $\omega_c = k_c c$.

Les figures 5.8 à 5.10 et 5.11 mettent clairement en évidence les grandes qualités des schémas Taylor-Galerkin en termes de résolution. En effet, ceux-ci sont clairement supérieurs à tous les autres schémas (y compris un schéma centré du quatrième ordre, censé être plus précis !), à l'exception du schéma de Padé d'ordre 6 avec lequel ils partagent l'implication en espace. Il faut toutefois souligner que le schéma de Padé est à peine meilleur que les schémas Taylor-Galerkin (la différence se fait en réalité sur la dissipation) pour un CFL de 0.3¹⁰.

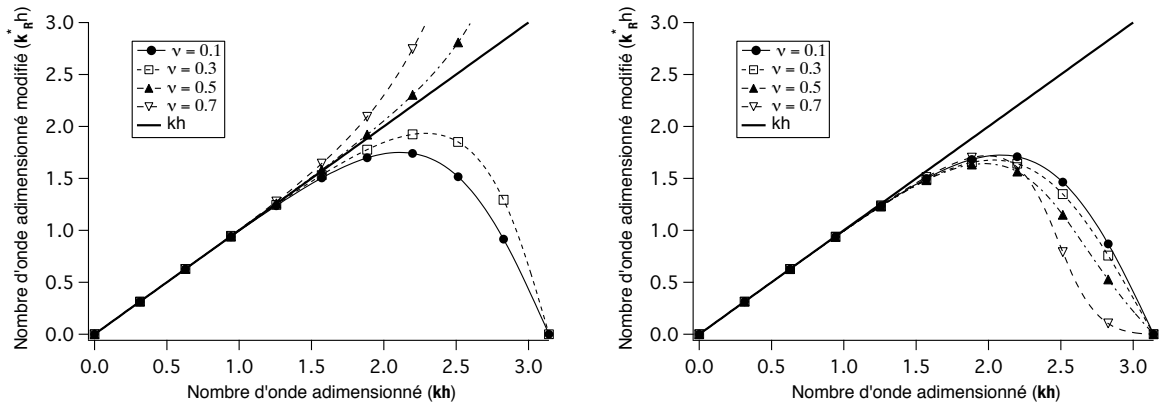


FIG. 5.10 - Parties réelles des nombres d'ondes modifiés adimensionnés des schémas TTG4A (à gauche) et TTGC (à droite) en fonction du nombre d'onde adimensionné pour différents CFL.

Schéma	$k_c h$
RK3-CV	1.00
LW	1.065
ETG	1.92
TTG3	1.92
TTG4A	1.935
TTGC(0.01) [?]	1.675

TAB. 5.2 - Résolution spectrale des différents schémas étudiés. $k_c = \max_k k_R^*$ est le nombre d'onde critique ou de coupure (le CFL est de 0.3).

¹⁰Le schéma de Padé a des performances quasi-indépendantes du CFL choisi en ce qui concerne la dispersion, puisque celle-ci est majoritairement due à la discrétisation spatiale.

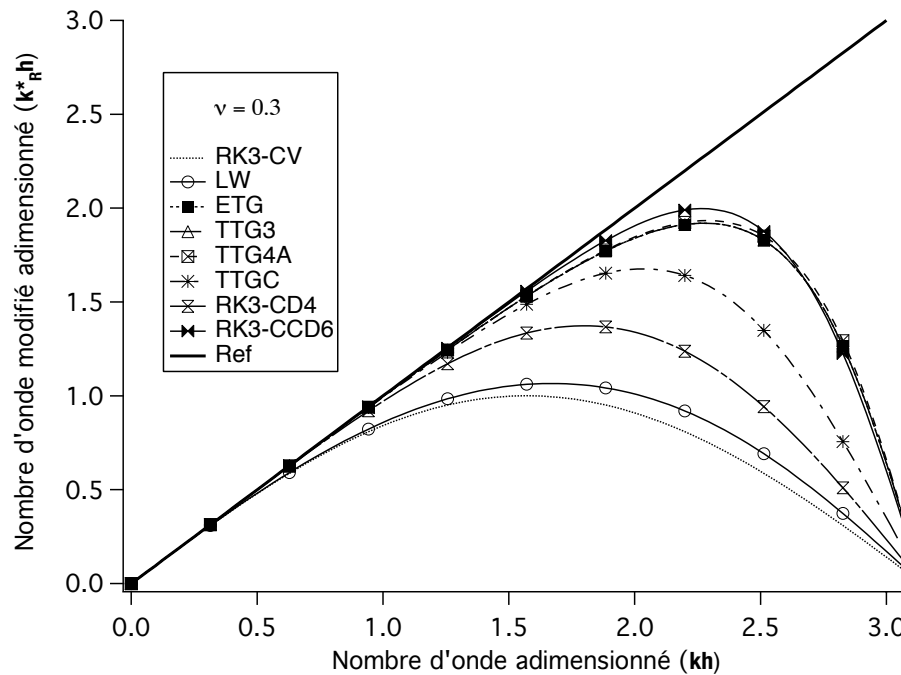


FIG. 5.11 - Comparaison des parties réelles des nombres d'ondes modifiés adimensionnés des différents schémas. Le CFL est égal à 0.3. Des schémas de référence comme les schémas centrés d'ordre 4 explicite et le schéma compact de Padé du 6ème ordre ont été ajoutés pour compléter la comparaison.

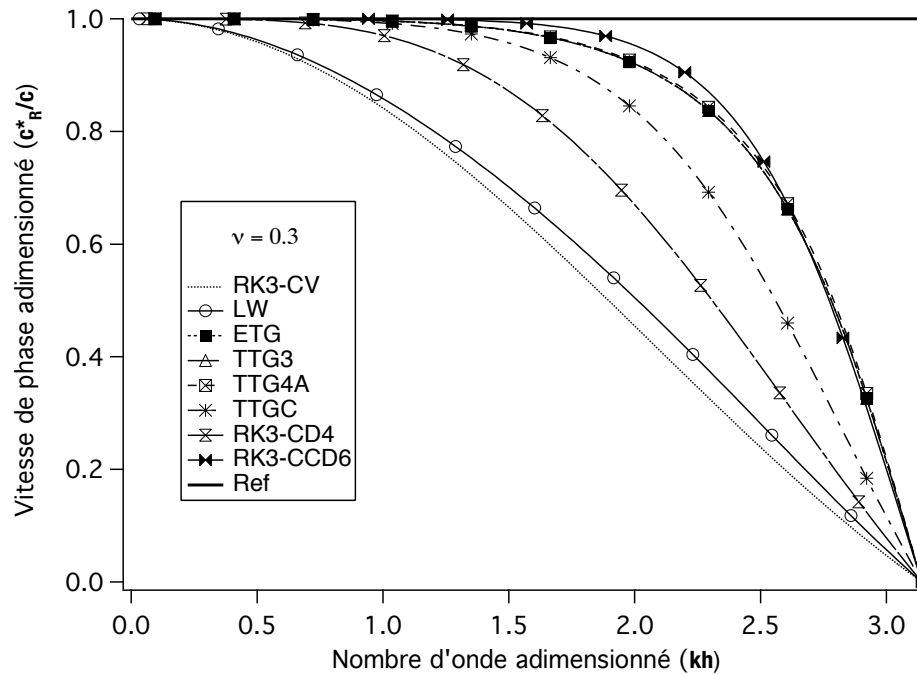


FIG. 5.12 - Comparaison de la vitesse de phase adimensionnée des différents schémas. Le CFL est égal à 0.3. Des schémas de référence comme les schémas centrés d'ordre 4 explicite et le schéma compact de Padé du 6ème ordre ont été ajoutés pour compléter la comparaison.

Etude de la DRP - Vitesse de groupe Le concept de DRP (*dispersion relation preservation* ou préservation de la relation de dispersion) a été introduit par Tam et Webb [?]. Le but de ces derniers est de concevoir un schéma numérique respectant la relation de dispersion physique $\omega = \Omega(k)$ sur la plus grande plage de k possible, même si cela doit se faire au détriment de l'ordre de convergence. Sengupta (toujours lui !) [?] souligne l'importance, pour un schéma de convection (donc utilisé pour la propagation d'ondes), de respecter au maximum cette propriété.

L'étude de la DRP revient à étudier la vitesse de groupe d'un paquet d'ondes de fréquence autour de k . Un schéma est d'autant plus performant que la vitesse de groupe des ondes fournie par celui-ci, correspond à la vitesse de groupe réelle. Les figures 5.13 et 5.14 indiquent les vitesses de groupes des paquets d'ondes, en fonction du nombre d'onde. Le tableau 5.3 indique le nombre d'onde à partir duquel l'erreur sur la vitesse de groupe est supérieure à 5%. Une observation des schémas centrés permet de rappeler quelques résultats classiques qu'on peut trouver dans [?, ?, ?, ?] : les ondes de longueur inférieure à une certaine valeur ont une vitesse de groupe négative ! Pour un schéma centré d'ordre 2, on a par exemple :

$$\mathcal{V}_g^*(\lambda = 4h) = 0 \quad \text{et} \quad \mathcal{V}_g^*(\lambda = 2h) = -c.$$

\mathcal{V}_g^* correspond à la vitesse de transport de l'énergie [?], cela signifie donc que toute l'énergie, contenue dans cette partie du spectre, sera convectée dans la direction opposée à ce qu'indique la physique ! Comme la vitesse de groupe est une notion liée à la dispersion, il n'est pas étonnant de voir, qu'une fois encore, les schémas Taylor-Galerkin offrent de très bons résultats. Pour un CFL de 0.7 (figure 5.14), on note quelques résultats intéressants :

- Le schéma LW a un comportement bien plus satisfaisant que le schéma aux différences centrées (plus le CFL est élevé, plus cette affirmation se confirme, en fait).
- Le schéma TTGC n'a pas le même comportement que les autres schémas de la même famille. L'erreur de dispersion étant à retard de phase, il n'est pas surprenant de voir qu'à partir d'une certaine valeur (aux alentours de $\lambda = \pi h$), la vitesse de groupe devient négative. Par ailleurs, celle-ci tend vers zéro quand $kh \rightarrow \pi$. Cela signifie que les *wiggles* avec $\lambda = 2h$ sont immobiles !
- Les autres schémas Taylor-Galerkin sont en avance de phase pour les hautes fréquences à partir d'un CFL aux alentours de 0.5. Par conséquent, les *wiggles* ont une vitesse de propagation qui, si elle n'est pas juste, est au moins positive.

L'intérêt de connaître les vitesses de groupe des ondes, et en particulier des *wiggles*, est aussi lié au comportement des schémas face aux variations de taille de maille ou près des bords [?]. En effet, Vichnevetsky [?] a montré que la sortie d'une onde "physique" (onde p) du domaine de calcul peut induire une réflexion (qui n'est évidemment pas physique). La même chose peut se produire lorsqu'une onde p atteint une variation importante de taille de maille. L'onde réfléchie est alors une onde "numérique" (onde q) de même pulsation ω_R^* mais de longueur environ égale à $2h$. Le coefficient de réflexion est intimement lié à la vitesse de groupe. Ainsi, on peut imaginer que si les *wiggles* ont aussi une vitesse de groupe positive, il n'y aura pas de réflexion numérique au niveau d'une sortie. Ce raisonnement tend donc à avantager les schémas Taylor-Galerkin par rapport aux autres, lorsque le CFL est suffisamment élevé.

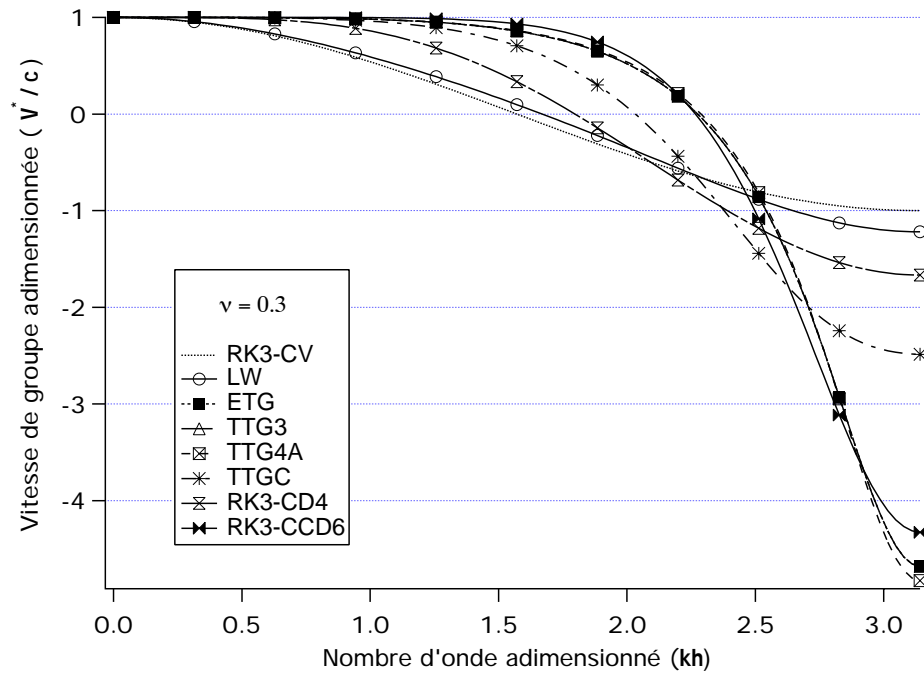


FIG. 5.13 - Comparaison des vitesses de groupe relatives à différents schémas. Le CFL est égal à 0.3. Des schémas de référence comme les schémas centrés d'ordre 4 explicite et le schéma compact de Padé du 6ème ordre ont été ajoutés pour compléter la comparaison.

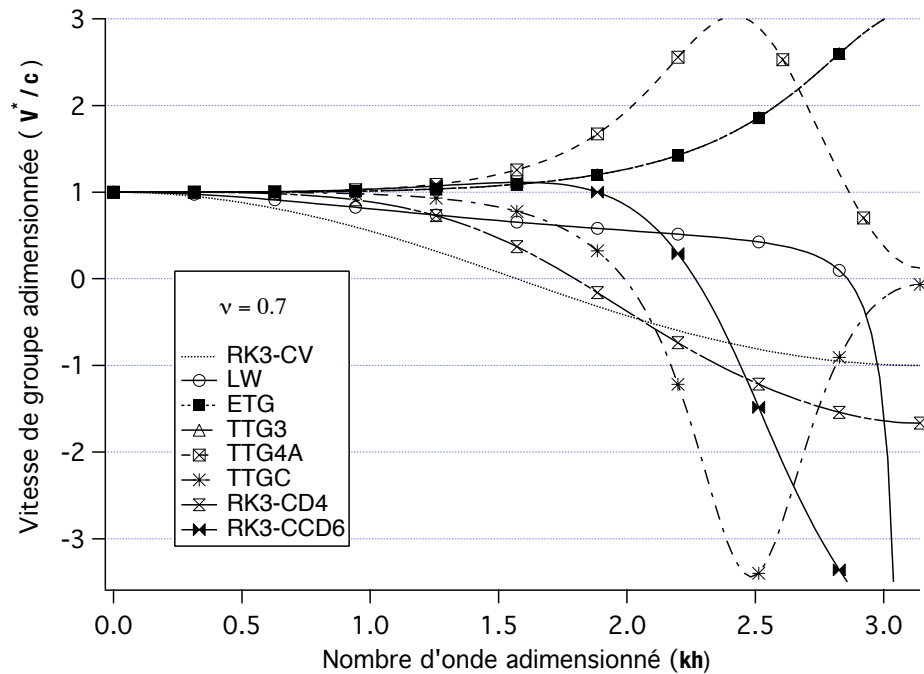


FIG. 5.14 - Comparaison des vitesses de groupe relatives à différents schémas. Le CFL est égal à 0.7. Des schémas de référence comme les schémas centrés d'ordre 4 explicite et le schéma compact de Padé du 6ème ordre ont été ajoutés pour compléter la comparaison.

Schéma	kh pour $\nu = 0.3$	λ pour $\nu = 0.3$	kh pour $\nu = 0.7$	λ pour $\nu = 0.7$
RK3-CV	0.32	19.64 h	0.32	19.64 h
LW	0.33	19.02 h	0.46	13.66 h
ETG	1.25	5.03 h	1.37	4.59 h
TTG3	1.25	5.03 h	1.37	4.59 h
TTG4A	1.265	4.97 h	1.099	5.72 h
TTGC(0.01) [?]	1.06	5.93 h	1.17	5.37 h

TAB. 5.3 - Nombres d'onde (et longueurs d'onde correspondantes) à partir desquels $\mathcal{V}_g^* > 1.05$ ou $\mathcal{V}_g^* < 0.95$.

5.3 Cas multidimensionnels

L'analyse présentée précédemment peut être généralisée aux cas multidimensionnels. Le principe est similaire et la construction du coefficient d'amplification, quoique fastidieuse, ne pose pas de difficulté particulière. On se limite donc aux cas bidimensionnels. L'intérêt est, avant tout, de mettre en avant le caractère parfois très anisotrope des méthodes numériques employées, ainsi que l'impact du passage de une à deux dimensions sur les limites du domaine de stabilité. Ici, l'étude se restreint aux **maillages formés de carrés de côté h** .

Dans l'étude présentée ici, on fait l'hypothèse suivante :

Hypothèse Le gradient de la phase $\Phi(x, t)$ du paquet d'onde considéré est colinéaire au vecteur vitesse \vec{c} , soit :

$$\vec{\nabla}\Phi // \vec{c}$$

Ce type d'étude est souvent réalisé et on retrouve des exemples dans [?, ?]. Il existe toutefois d'autres types d'études multidimensionnelles comme celle qu'on peut trouver dans la thèse de Rudgyard [?]. Cette dernière est plus complète mais demeure moins évidente à analyser, vis à vis des points qu'on cherche, ici, à mettre en évidence.

5.3.1 Anisotropie

On introduit de nouvelles notations :

- k_x et k_y sont les nombres d'onde dans les directions Ox et Oy .
- α est l'angle entre l'axe des abscisses Ox et le vecteur vitesse s'écrit $\vec{c} = (c \cos \alpha, c \sin \alpha)^T$ et donc $k_x = k \cos \alpha$ et $k_y = k \sin \alpha$.

On construit ainsi les coefficients d'amplification $G(k, \alpha)$ en suivant la même procédure que celle décrite pour les cas monodimensionnels, section 5.2. Les figures 5.16 à 5.19 indiquent les modules des coefficients d'amplification $|G(k, \alpha)|$ et les vitesses de phase adimensionnées $c_R^*(k, \alpha) = -\frac{\phi_G(k, \alpha)}{\nu kh}$ des schémas RK3-CV, LW, TTGC et TTG4A pour des CFL de 0.3 et 0.7. Ces graphes sont en coordonnées polaires ($|G|, \alpha$) ou $(c_R^*/c, \alpha)$. La figure 5.15 résume le principe des graphes qu'on présente par la suite. Chaque courbe, représentant le module ou la vitesse de phase, est tracée pour un nombre d'onde k (donc une longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k$) fixé. On choisit de donner $|G|$ et c_R^*/c pour les longueurs d'onde : $2h$, $3h$, $4h$, $8h$ et pour une grande longueur d'onde (bien résolue et qu'on considère comme tendant vers l'infini).

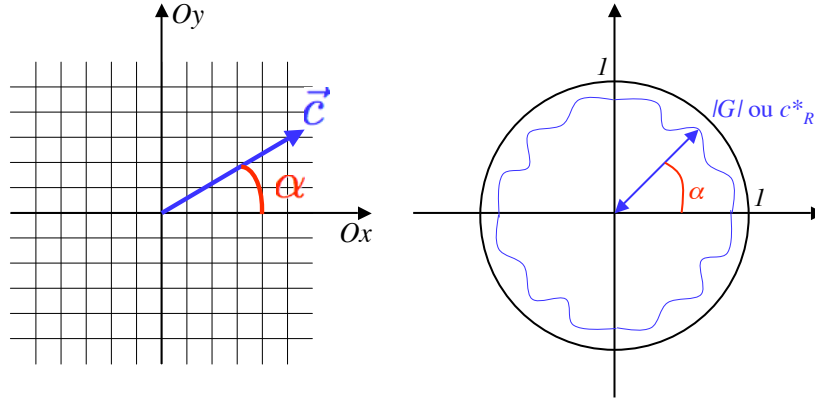


FIG. 5.15 - Définition de l'angle α par rapport au maillage (à gauche) et construction du graphe permettant d'étudier le module ou la vitesse de phase à un nombre d'onde fixé, en fonction de α .

Pour les grandes longueurs d'onde, tous les schémas sont isotropes et les caractéristiques en termes de dissipation et dispersion sont sensiblement les mêmes qu'en 1D, comme on les a décrites précédemment. En revanche, pour des longueurs d'onde inférieures ou égales à $4h$, les défauts apparaissent bien plus clairement. Les remarques principales sont les suivantes :

- Le schéma LW *cell-vertex* ne dissipe pas ou peu les wiggles $2h$ dans les directions diagonales (d'où les wiggles en damier qui apparaissent dans beaucoup de calculs). De plus, l'erreur de dispersion est très grande dans ce cas.
- LW *cell-vertex* a des performances plus intéressantes dans les directions principales du maillage que dans les diagonales (wiggles dissipés, moins de dispersion)...
- ... à l'inverse, on note que les schémas Taylor-Galerkin ont une plus faible erreur de dispersion dans les directions diagonales.
- TTGC est le moins dissipatif de tous les schémas. TTG4A est le moins dispersif.
- La figure 5.19 montre une fois de plus que TTG4A est en avance de phase pour les faibles longueurs d'onde à un CFL de 0.7 ($c_R^* > c$).

5.3.2 Stabilité

Le CFL est désormais une grandeur vectorielle [?] qu'on écrit :

$$\vec{\nu} = \nu(\cos \alpha, \sin \alpha)^T$$

et ν est le module de $\vec{\nu}$. De la même manière que dans les cas monodimensionnels, on utilise le code de calcul donnant $|G(k, \alpha)|$ et $c^*(k, \alpha)/c$, afin de déterminer numériquement les limites de stabilité des schémas numériques utilisées dans AVBP. Les résultats obtenus sont indiqués dans le tableau 5.4. Sur la troisième colonne, on indique dans quelle direction de propagation le schéma devient instable. En effet, dans certains cas, un schéma peut rester stable si le train d'onde considéré est advecté dans les directions du maillage, malgré un CFL plus grand que la limite indiquée dans le tableau 5.4. Cependant, dans un calcul, il est rare, voire impossible, de n'avoir des phénomènes propagatifs que dans une seule direction.

Le tableau 5.4 met en évidence l'intérêt d'écrire les schémas Taylor-Galerkin en deux étapes. En effet, les domaines de stabilité des schémas TTG3, TTG4A et TTGC sont très peu modifiés par rapport au cas

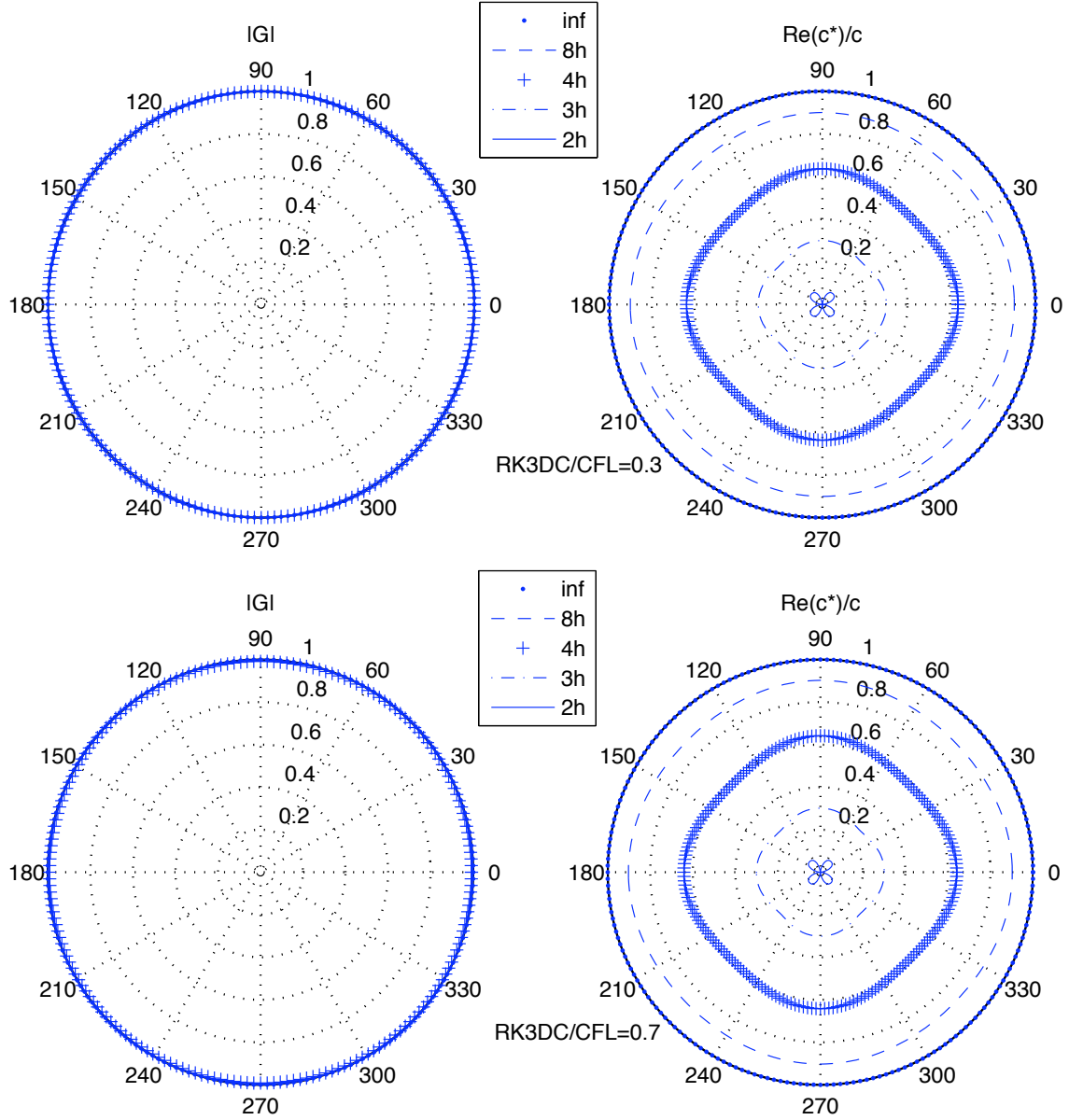


FIG. 5.16 - Module du coefficient d'amplification (à gauche) et vitesse de phase adimensionnée (à droite) pour différentes longueurs d'onde et en fonction de α . Le schéma numérique est le schéma RK3-CV cell-vertex. En haut, le CFL est de 0.3 et en bas, il est égal à 0.7.

1D. En revanche, le schéma ETG voit son domaine de stabilité sensiblement réduit (en 3D, on obtiendrait $\nu_c = 1/3$, [?]). On note ici que d'autres critères sont disponibles dans la littérature, pour des éléments linéaires. Les schémas TTG3 et TTG4A ont, sur ces éléments, une propriété remarquable : le critère de stabilité est le même, quelle que soit la dimension : $\nu_c = \sqrt{3/4}$ pour le premier et $\nu_c = 1$ pour le second. Par ailleurs, les schémas *cell-vertex* semblent aussi, au vu des tests réalisés, avoir cette même propriété.

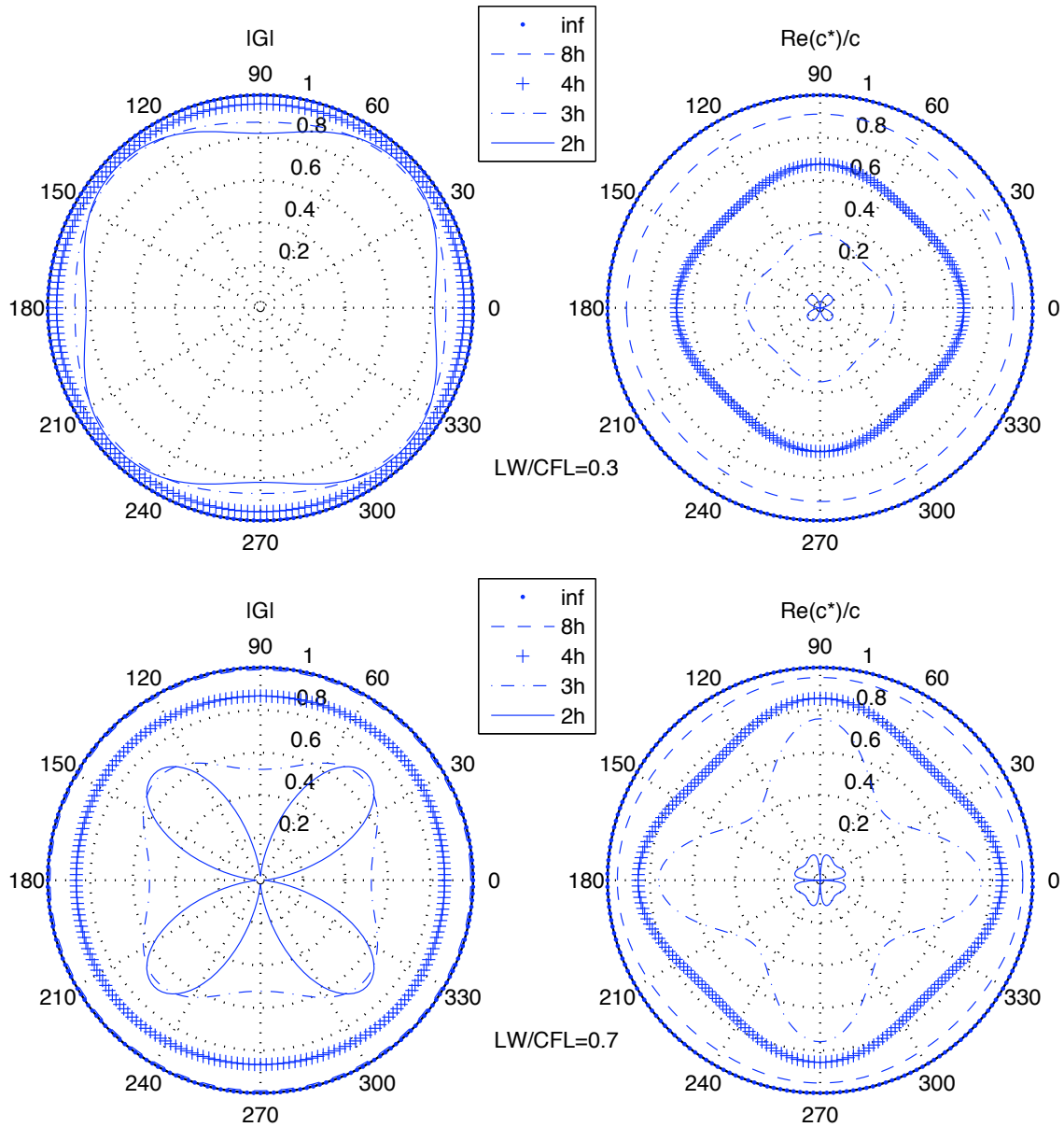


FIG. 5.17 - Module du coefficient d'amplification (à gauche) et vitesse de phase adimensionnée (à droite) pour différentes longueurs d'onde et en fonction de α . Le schéma numérique est le schéma LW cell-vertex. En haut, le CFL est de 0.3 et en bas, il est égal à 0.7.

5.4 Comparaisons des schémas d'AVBP- expériences numériques

Les "expériences numériques" présentées ici permettent de confirmer, *a posteriori*, les conclusions apportées par les analyses théoriques des schémas numériques faites dans ce chapitre. Ainsi, on peut mesurer la précision des schémas et mettre en évidence certains effets néfastes de la diffusion ou de la dispersion numérique. Il existe un grand nombre de cas tests dans la littérature. Ceux qui sont présentés ici ont été choisis, car ils représentent une partie des phénomènes présents dans une chambre de combustion.

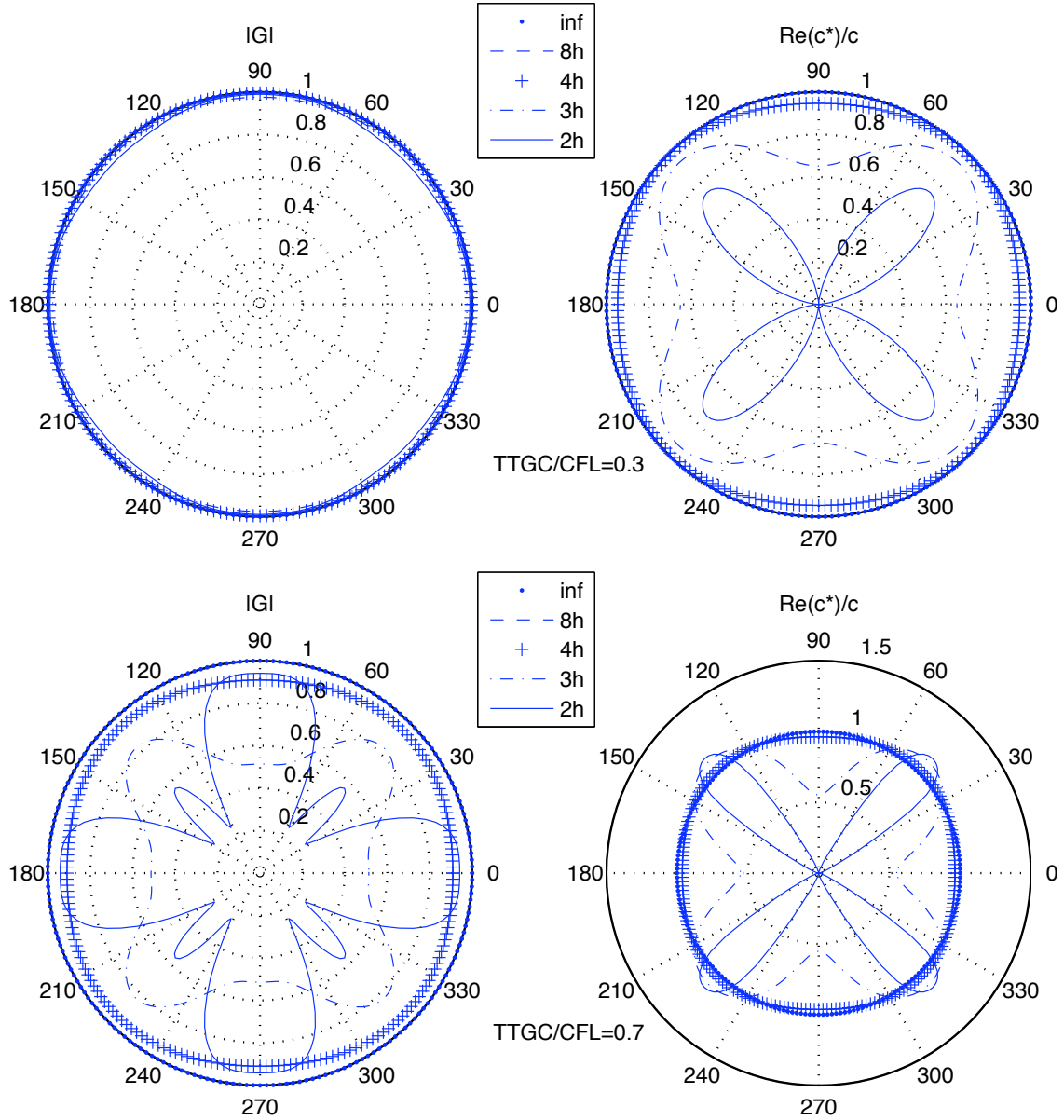


FIG. 5.18 - Module du coefficient d'amplification (à gauche) et vitesse de phase adimensionnée (à droite) pour différentes longueurs d'onde et en fonction de α . Le schéma numérique est le schéma TTGC cell-vertex. En haut, le CFL est de 0.3 et en bas, il est égal à 0.7.

5.4.1 Convection

Le cas le plus simple à étudier est évidemment la convection linéaire et permet d'observer l'évolution d'un scalaire (fraction massique ou fraction volumique, par exemple) en présence d'un champ de vitesse. Pour simplifier l'étude au maximum, on impose un champ de vitesse \vec{c} uniforme dans tout le domaine de calcul et constant en temps, qui transporte un champ de scalaire passif défini à l'instant initial par $u(x, 0) = u_0(x)$. On étudiera deux types de conditions initiales. La première, très régulière, permet de calculer la précision des méthodes étudiées. La seconde, discontinue, va démontrer la limitation des schémas centrés. La figure 5.20 présente les deux types de maillages utilisés dans la suite. Le domaine

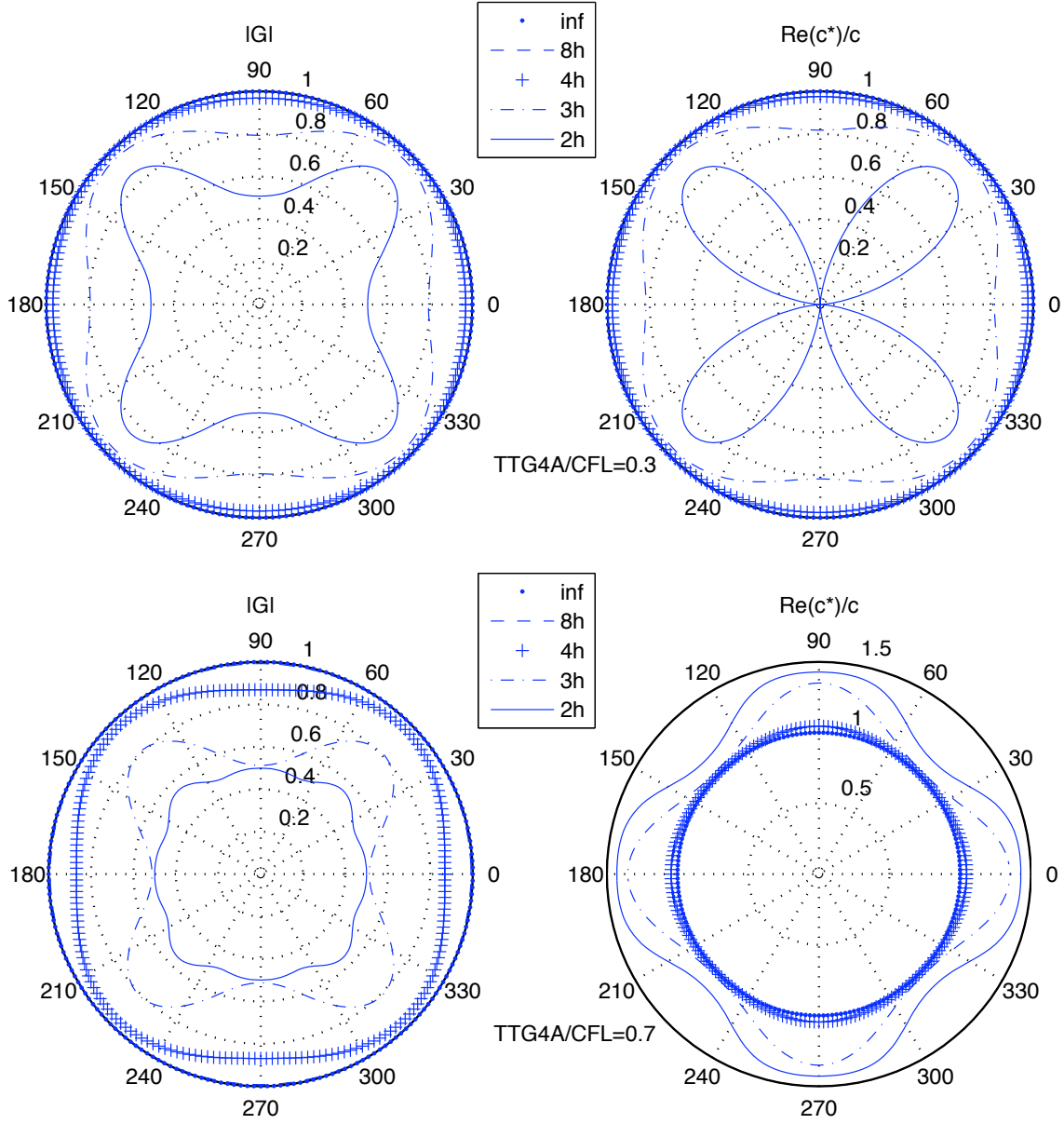


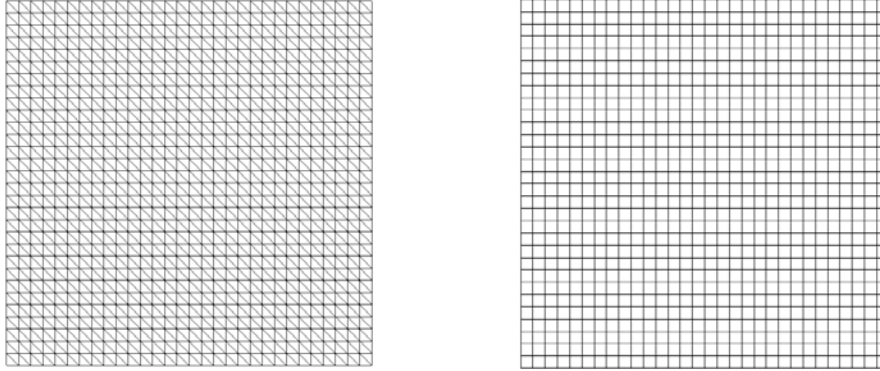
FIG. 5.19 - Module du coefficient d'amplification (à gauche) et vitesse de phase adimensionnée (à droite) pour différentes longueurs d'onde et en fonction de α . Le schéma numérique est le schéma TTG4A cell-vertex. En haut, le CFL est de 0.3 et en bas, il est égal à 0.7.

de calcul est défini de la manière suivante :

$$\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$$

Schéma	ν_c	Direction
<i>RK3-CV</i>	$\sqrt{3}$	<i>Ox</i> et <i>Oy</i>
<i>LW</i>	1	<i>Ox</i> et <i>Oy</i>
<i>ETG</i>	0,500	diagonales
<i>TTG3</i>	0,853	diagonales
<i>TTG4A</i>	0,900	diagonales
<i>TTGC(0.01)</i>	0,813	diagonales

TAB. 5.4 - Domaine de stabilité des schémas étudiés sur un maillage composé de carrés.


 FIG. 5.20 - Maillages utilisés pour les cas académiques présentés dans ce chapitre. A gauche, un maillage avec des triangles réguliers 31×31 , à droite un maillage de carrés 31×31 .

Cas n°1 : Gaussienne

Le premier champ de scalaire à transporter est une impulsion de forme gaussienne donc une fonction régulière et C^∞ . Celle-ci est définie par :

$$\begin{cases} \vec{x} \in [0, 1] \times [0, 1] \\ \vec{c} = (1, 0)^T \text{ ou } \vec{c} = (1, 1)^T \\ u_0(x) = \exp\left(\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \exp\left(\frac{(y-y_0)^2}{2\sigma^2}\right) \end{cases}$$

avec $\sigma = 0.05$ m, $(x_0, y_0)^T = (0.5, 0.5)^T$ et donc d'après (5.1), on doit avoir : $0 \leq u(x, t) \leq 1 \quad \forall (\vec{x}, t)$. La figure 5.21 est une illustration de la condition initiale et la figure 5.22 montre le résultat obtenu avec le schéma LW après un tour (on a choisi ce schéma plutôt qu'un schéma TTG car la différence avec la solution initiale est parfois imperceptible à l'oeil avec ces schémas d'ordre 3). Pour réaliser l'étude de convergence, on utilise la solution obtenue à $t = 1$ s (soit 1 tour), tous les schémas ayant été utilisés avec un CFL de 0.1 environ.

L'erreur $\epsilon = u - u_h$ est proportionnelle à l'erreur de troncature $ET_{h,\Delta t}$ [?, ?], définie par la formule (5.8). Pour mesurer numériquement la précision d'un schéma, on procède donc de la façon suivante : si le schéma est précis à l'ordre s , alors $\epsilon = \mathcal{O}(h^s)$ et de même que sa norme L^2 (définition (5.9)) et :

$$\log \epsilon = \log K - s \log h.$$

Ainsi pour calculer la précision spatiale du schéma, il suffit d'effectuer plusieurs simulations identiques en changeant la taille caractéristique des mailles, puis tracer le logarithme de l'erreur. La pente fournit l'ordre du schéma. La figure 5.23 fournit les résultats obtenus en réalisant le cas test sur différents

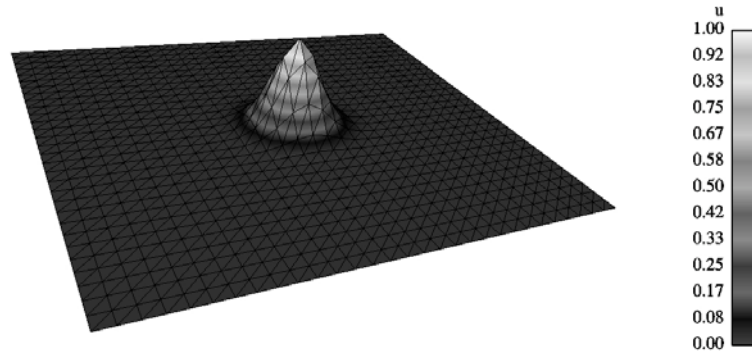


FIG. 5.21 - Champ $u_0(x)$ pour la convection de l'impulsion gaussienne sur un maillage avec des triangles réguliers 31×31 .

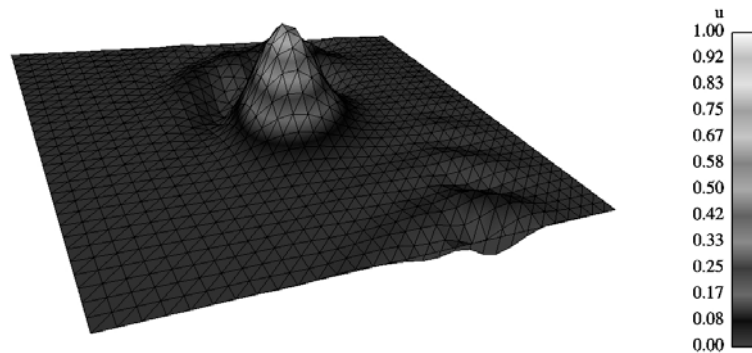


FIG. 5.22 - Champ $u(x, 1)$ obtenu avec le schéma LW pour la convection de l'impulsion gaussienne sur des triangles réguliers 31×31 . Attention ici, le maximum correspond à $\max_j(U_j) \approx 0.56$. On a choisi de ne pas mettre la même échelle que pour la figure 5.21 pour bien mettre en évidence les effets dispersifs.

maillages et confirme les ordres de convergence théoriques. Cette figure met aussi en évidence la différence, non négligeable, qui existe entre les schémas d'ordre 3 et les autres. En effet, en plus d'avoir une pente plus forte, l'erreur est, dans l'absolu, beaucoup plus faible, même sur maillage grossier : par exemple, la norme de l'erreur faite par TTGC sur le maillage 31×31 est à peu près égale à celle obtenue avec LW sur maillage 131×131 !

La figure 5.24 montre une coupe dans la direction Ox à $y = 0, 5$. On note trois comportements pour les trois types de schémas testés (GRK et LW-EF n'apparaissent pas pour ne pas charger la figure, sachant qu'ils fournissent des résultats sensiblement identiques à ceux de TTG4A et TTGC).

- Les schémas d'ordre 1, dans le cas présent, donnent les mêmes résultats. L'onde gaussienne est très diffusée (le maximum est à seulement un tiers de sa valeur originelle), sa forme gaussienne très étalée. En revanche, il n'y a pas de dispersion : la gaussienne est "propre" (pas d'oscillations numériques) car les hautes fréquences ont été dissipées. En conséquence, le maximum est au bon endroit ($x = 0, 5$).
- Les schémas d'ordre 2 sont beaucoup moins dissipés (le maximum est environ aux trois quarts de la valeur initiale). En revanche, les effets de dispersion se font fortement sentir (oscillations en amont de la gaussienne) et, de ce fait, le maximum ne se trouve pas à $x = 0, 5$ après un tour. D'autre part, les oscillations numériques indiquent que le principe du maximum n'est pas respecté : l'amplitude de l'onde convectée n'est plus comprise entre 0 et 1 (les bornes initiales).
- Sur ces cas tests, les schémas d'ordre 3 donnent une solution quasi-parfaite. En regardant dans le

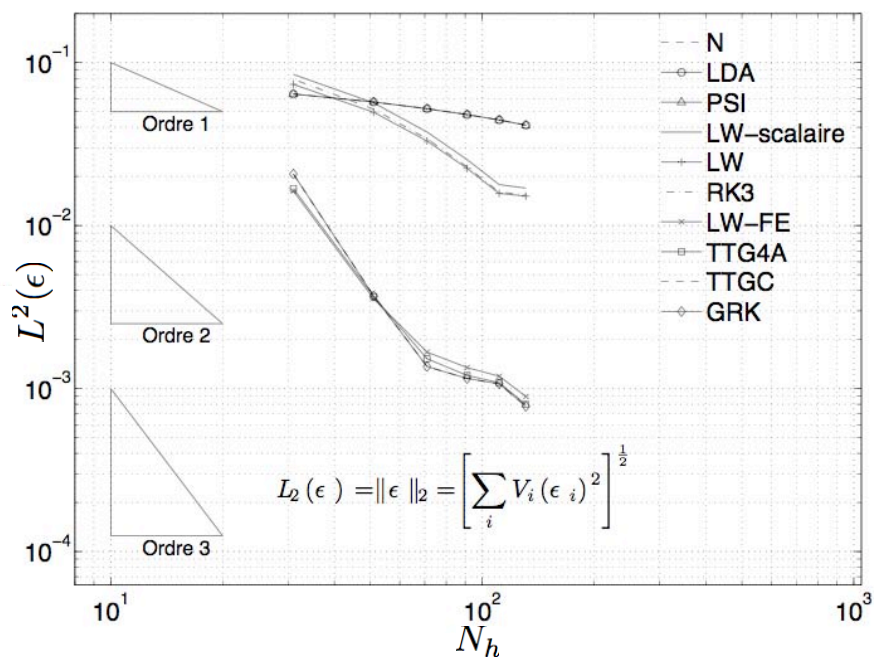


FIG. 5.23 - Convergence en maillage pour le cas de la gaussienne avec différents schémas numériques pour le cas $\vec{c} = (1, 0)^T$.

détail, on note que le maximum de TTG4A est légèrement plus faible que celui de TTGC et que le principe du maximum n'est pas non plus respecté.

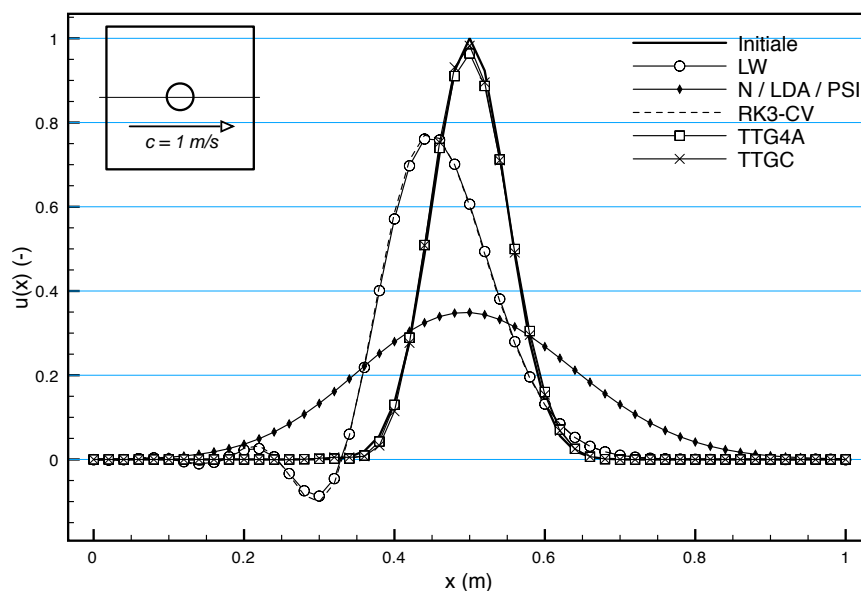


FIG. 5.24 - Profils de $u_h(x)$ pour $y = 0,5$ après un tour complet.

Lorsque le vecteur vitesse \vec{c} change, l'erreur n'est plus exactement la même, bien que pour tous les

schémas, l'ordre de convergence n'est pas modifié (voir figure 5.25). Ceci est dû, comme on l'a montré section 5.3, à l'anisotropie des schémas numériques qui possèdent des directions de propagation privilégiées. L'ordre de grandeur de l'erreur, ainsi que sa vitesse de convergence restent toutefois les mêmes.

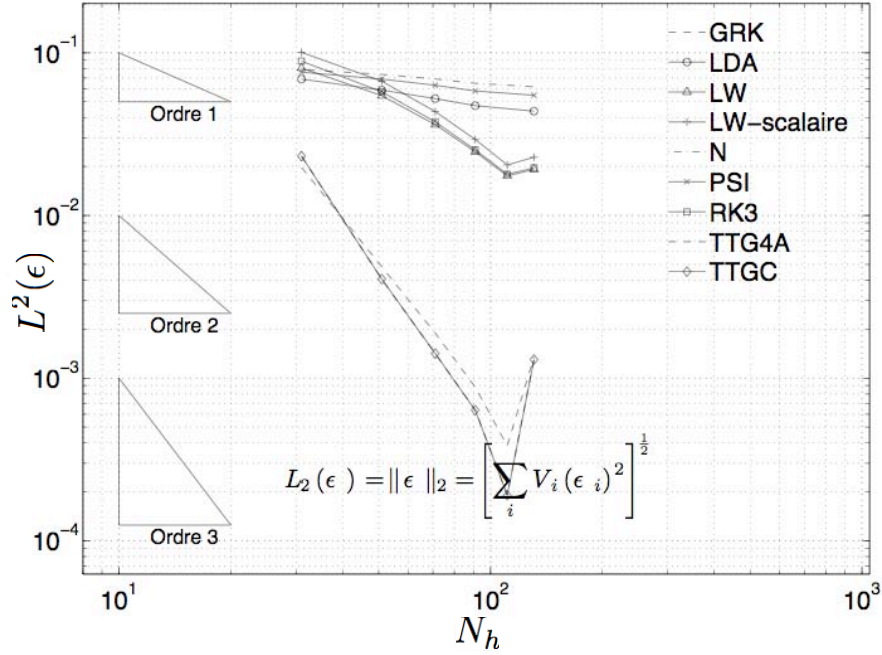


FIG. 5.25 - Convergence en maillage pour le cas de la gaussienne avec différents schémas numériques pour le cas $\vec{c} = (1, 1)^T$.

Enfin la figure 5.26 indique l'erreur réalisée par les schémas numériques sur des maillages composés de carrés¹¹. Celle-ci est globalement la même que pour des triangles. Toutefois, il faut noter que le pas de temps n'est pas le même pour les deux types de maillages. Ainsi, le pas de temps pour les triangles est environ $\sqrt{2}$ fois plus petit. Dans ce type de cas, on voit donc l'intérêt d'un maillage de quadrangles.

¹¹Pour le moment, les schémas upwind multidimensionnels ne sont définis que sur des simplexes. La généralisation à des quadrangles en 2D existe [?] mais n'est pas étudiée ici.

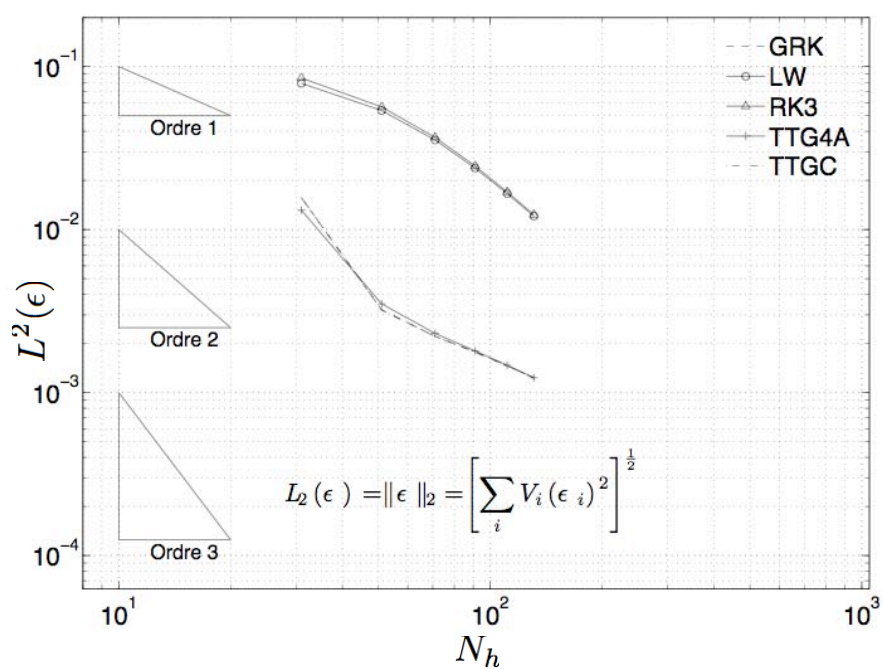


FIG. 5.26 - Convergence en maillage pour le cas de la gaussienne avec différents schémas numériques pour le cas $\vec{c} = (1, 0)^T$. Ici les maillages sont composés de carrés.

Cas n°2 : Cylindre

On répète les tests précédents en changeant la condition initiale. Celle-ci est désormais définie de la manière suivante :

$$\begin{cases} \vec{x} \in [0, 1] \times [0, 1] \\ \vec{c} = (1, 0)^T \\ u_0(x) = 1 \text{ si } \|\vec{x} - \vec{x}_0\| \leq r, \quad 0 \text{ sinon.} \end{cases}$$

et $r = 0.05m$. La fonction est continue par morceaux et n'est plus dérivable en tout point. Le tracé de l'erreur, figure 5.27, indique que les schémas convergent vers la solution. Cependant, l'ordre de convergence est inférieur à 1 et l'erreur commise est bien supérieure à ce qui est montré figure 5.23. Les schémas peu dissipatifs sont ceux dont la qualité est la plus dégradée par rapport au cas précédent. En effet, toutes les méthodes de résolution souffrent du phénomène de Gibbs (oscillations numériques près des discontinuités), dû à la discrétisation spatiale. Les oscillations produites ont une longueur d'onde faible. Or les schémas d'ordre supérieur à 2 ne les dissipent pas ou peu. En outre, ils convectent certaines des oscillations non-physiques à des vitesses de groupe erronées, du fait de leur erreur de dispersion. De ce fait, l'erreur globale devient importante, comme on peut le voir sur la figure 5.28. On note finalement que le schéma TTG4A a le meilleur comportement parmi les schémas d'ordre élevé.

A l'inverse, les schémas upwind sont peu sensibles à ce phénomène. Ainsi, ils commettent des erreurs qui ne sont que légèrement plus élevées que pour la convection d'une gaussienne. Globalement, l'ordre de convergence et la valeur de l'erreur sont très peu détériorés par rapport au cas précédent. En outre, comme dans le cas de la gaussienne, ils respectent le principe du maximum.

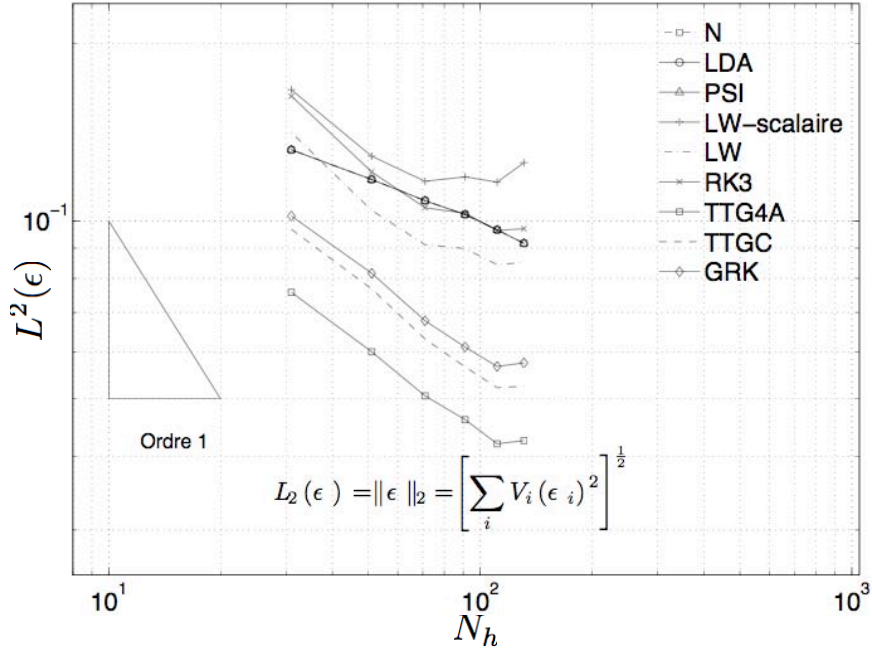
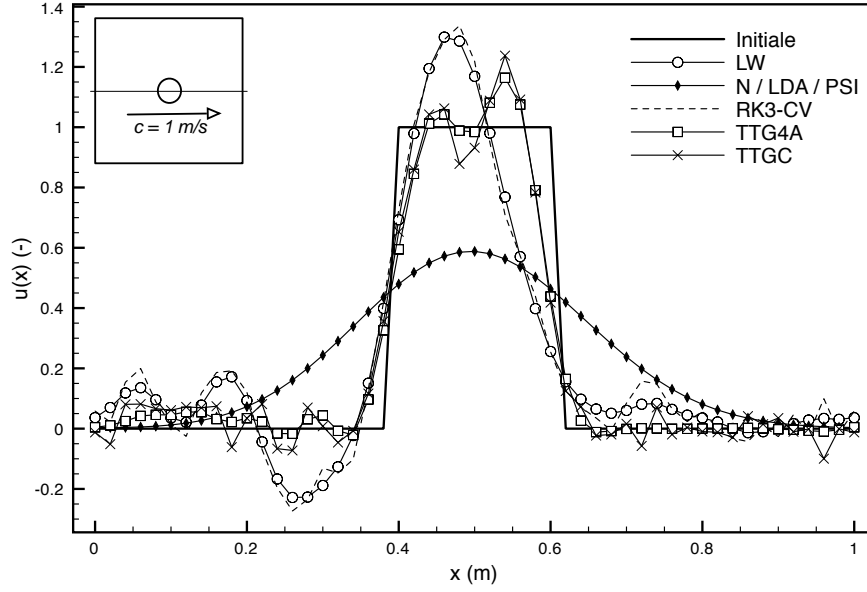


FIG. 5.27 - Convergence en maillage pour le cas du créneau avec différents schémas numériques.


 FIG. 5.28 - Profils de $u_h(x)$ pour $y = 0,5$ après un tour complet (condition initiale : onde en créneau).

5.4.2 Vortex

Dans un calcul réel (avec diffusion et modèles de turbulence), un tourbillon peut subir des contraintes qui vont changer sa forme, sa taille... Ces contraintes peuvent être d'origine physique et, malheureusement aussi, d'origine numérique. Ce cas simple d'un vortex bidimensionnel convecté représente, de manière simplifiée la façon dont la résolution des schémas va modifier une structure turbulente à cause des erreurs de dissipation et de dispersion relatives au schéma de convection. Le domaine de calcul est le même que pour les cas de convection précédents (carré de 1m de côté). L'écoulement est isentropique et le vortex est défini par les champs de vitesse et de pression suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{x} \in [0, 1] \times [0, 1] \\ u = \bar{u} - \frac{\Gamma}{R^2} y e^{-\frac{x^2+y^2}{2R^2}} \quad v = \frac{\Gamma}{R^2} x e^{-\frac{x^2+y^2}{2R^2}} \quad p - \bar{p} = -\frac{\bar{\rho}\Gamma^2}{R^2} e^{-\frac{x^2+y^2}{2R^2}} \end{array} \right.$$

Le calcul est réalisé avec un CFL acoustique de 0.7 et le fluide considéré est de l'air à pression et température ambiantes (1 atm et 300K). Ici, l'erreur est calculée sur la masse volumique locale ρ_j (qui ne reste pas constante) après avoir adimensionné celle-ci par la masse volumique initiale $\bar{\rho}$. On note que TTGC produit les meilleurs résultats. L'ordre de convergence est particulièrement bon (nettement supérieur à 3, quand TTG4A est légèrement inférieur à 3), comme l'indique la figure 5.29. La pression obtenue après un tour concorde avec la solution initiale (figure 5.30), ce qui n'est pas tout à fait le cas avec TTG4A qui est légèrement dissipé au niveau du maximum (celui-ci se trouve au bon endroit en revanche). Comme on s'y attendait, le schéma LW montre des performances bien en deçà des schémas Taylor-Galerkin. L'ordre de convergence est plutôt aux alentours de 1, le tourbillon n'a pas été convecté à la bonne vitesse. En outre, la dépression en son centre est plus faible.

Les schémas Taylor-Galerkin montrent, avec ce test simple, leur capacité à simuler la turbulence et en particulier TTGC, qui, ne dissipant quasiment pas, n'interagira que très peu avec la physique de l'écoulement.

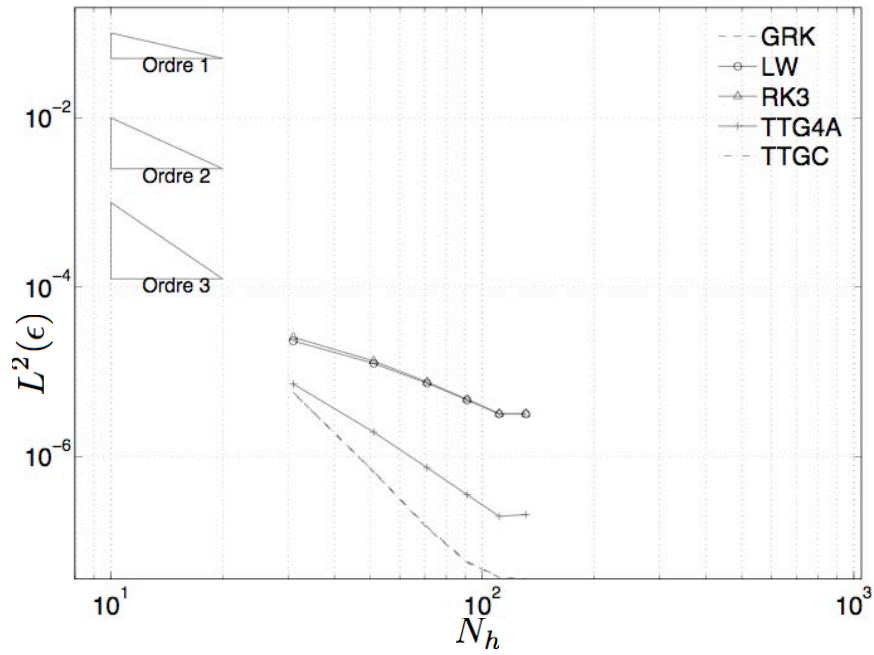


FIG. 5.29 - Convergence en maillage pour le cas du tourbillon avec différents schémas numériques.

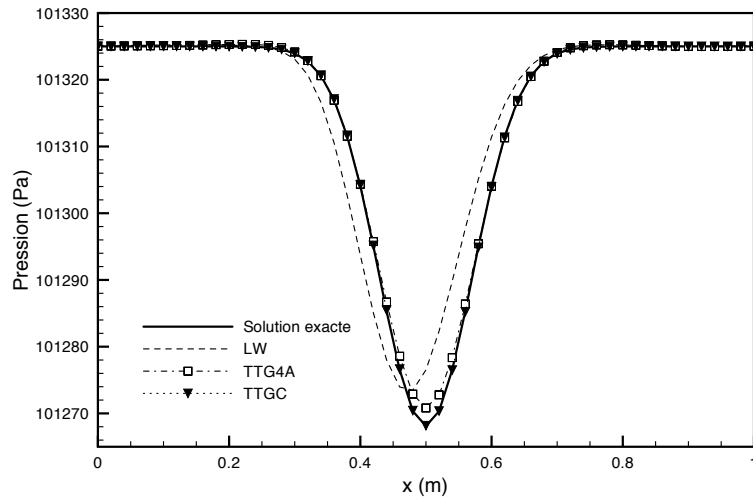


FIG. 5.30 - Profils de pression en $y = 0.5$.

Attention : Sur certaines figures de convergence, on peut noter un comportement chaotique pour le maillage le plus fin - l'erreur est parfois plus importante que pour des grilles plus grossières (comme sur la figure 5.25, par exemple), ce qui n'est pas attendu. Ce problème a une explication. Le calcul de l'erreur est théoriquement réalisé à $t = 1$ s. Or les simulations sont faites à CFL constant et non à pas de temps constant. Par conséquent, le temps final des simulations est en réalité $t = 1 + \epsilon$ s, avec ϵ très faible mais non nul. Ainsi le calcul de l'erreur est légèrement faussé et cet effet devient sensible pour les

maillages les plus fins.

5.4.3 Onde acoustique linéaire

Une des caractéristiques d'AVBP, par rapport à bon nombre de codes de calcul permettant de réaliser des LES réactives, est de résoudre les écoulements de fluides **compressibles**. Une résolution fidèle du champ acoustique est nécessaire pour observer la génération et l'évolution des instabilités de combustion. On étudie donc ici le comportement d'une onde acoustique plane monochromatique et progressive définie telle que $p' = \bar{\rho}cu'$, où les grandeurs moyennes sont notées $\bar{\phi}$ et les champs acoustiques avec ϕ' . Les grandeurs acoustiques ont une amplitude très faible devant les grandeurs moyennes (pour rester dans le domaine linéaire). On a :

$$p'(x, 0) = 100 \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) = \bar{\rho}cu' \quad \text{et} \quad L = 1 \text{ m},$$

et toutes les autres grandeurs sont choisies pour reproduire de l'air au repos et à température et pression ambiantes (300K et 1 atm). Les champs initiaux imposés sur la vitesse et la pression sont indiqués figure 5.31.

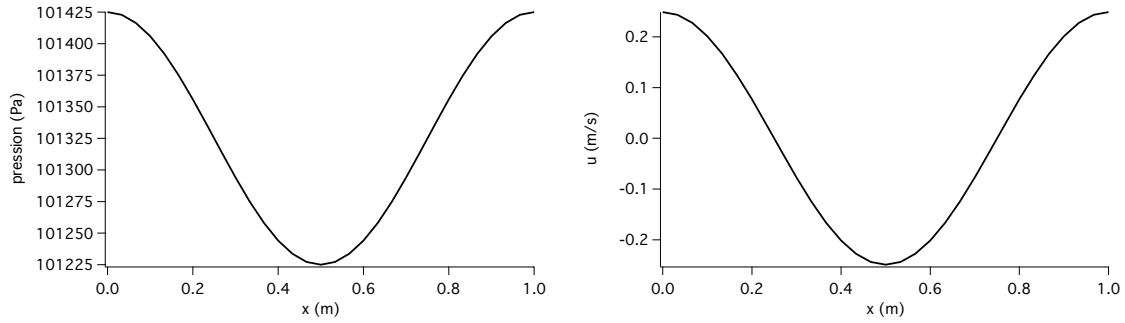


FIG. 5.31 - Conditions initiales sur la pression et la vitesse pour simuler la propagation d'une onde acoustique monochromatique.

Le domaine Ω est monodimensionnel et périodique. On a choisi $N_h = 31$, ce qui fait une longueur d'onde $\lambda = 30h$. Le CFL acoustique est fixé à 0.7.

La théorie indique que l'amplitude de l'onde ne doit pas changer au cours du temps. On présente, figure 5.32, la variation temporelle de la pression sur le point situé au milieu du domaine, afin d'étudier les effets dissipatifs des schémas numériques sur l'acoustique pour les schémas LW et TTGC.

Après $N_t = 4328$ itérations, ce qui correspond à environ 100 périodes, on compare la grandeur de $\frac{\|p'_{calcul}\|_{\infty}}{\|p'_{theo}\|_{\infty}}$ avec $|G|^{N_t}$ pour $kh = \frac{\pi}{15}$. Le tableau 5.5 indique les valeurs obtenues et comme attendu, il y a quasiment égalité entre théorique et calcul, ce qui confirme la validité de la méthode de Von Neumann dans le cas présent. L'onde acoustique peut être en effet vue comme un scalaire transporté à la vitesse c . Ainsi, toutes les conclusions déjà faites dans le cadre de la convection linéaire concernant la dissipation et la dispersion sont applicables ici.

En règle générale, les oscillations acoustiques qui présentent un danger potentiel, en termes d'instabilités de combustion, sont plutôt basses fréquences (inférieures à 1000 Hz - il s'agit souvent du premier

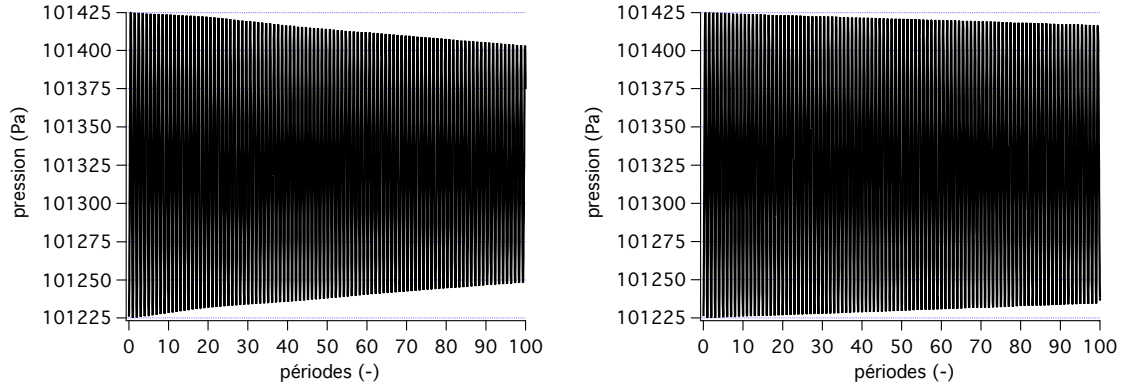


FIG. 5.32 - Evolution temporelle de la pression au milieu du domaine de calcul. A gauche : LW. A droite : TTGC. Les courbes en trait pointillé correspondent à la valeur théorique de référence.

Schéma	AVBP	$ G ^{N_t}$
LW	78% ($-22Pa$)	$\approx 77\%$ ($G \simeq 0.99994$)
TTGC	91% ($-9Pa$)	$\approx 92\%$ ($G \simeq 0.99998$)

TAB. 5.5 - Comparaisons entre résultats de calculs avec AVBP et la valeur théorique fournie par l'analyse de Von Neumann.

mode longitudinal, en général un quart d'onde ou un demi-onde). Les longueurs d'onde associées sont de l'ordre du mètre, sachant que la taille de maille dans un calcul est inférieure au centimètre (voire au millimètre), soit (bien) plus de 100 points dans un quart ou la moitié d'une longueur d'onde ! A cette échelle, le coefficient d'amplification est quasiment égal à 1 pour tous les schémas, donc ces pulsations acoustiques sont très bien résolues.

5.4.4 Viscosité artificielle

Stabilité des opérateurs

On étudie ici les termes de viscosité artificielle, toujours sur un maillage **monodimensionnel** et **régulier**. Comme les deux opérateurs approximent des laplaciens, alors on peut les exprimer de la manière suivante :

$$\mathbf{D}_j^{(2)} = -\frac{\nu_j^{AV}}{V_j} \int_{C_j} \Delta \mathbf{U} dV \quad (5.56)$$

$$\mathbf{D}_j^{(4)} = \frac{\kappa_j^{AV}}{V_j} \int_{C_j} \Delta \Delta \mathbf{U} dV \quad (5.57)$$

Ceci permet de donner les expressions des viscosités et hyperviscosités artificielles :

$$\nu_j^{AV} = \frac{\epsilon_j^{(2)} \zeta_j h^2}{4\Delta t} \quad \text{et} \quad \kappa_j^{AV} = \frac{\epsilon_j^{(4*)} h^4}{16\Delta t},$$

avec $\zeta_j = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{\zeta_e V_e}{n_v^e}$ et $\epsilon_j^{(4*)} = \frac{1}{V_j} \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \frac{\epsilon_e^{(4*)} V_e}{n_v^e}$. Ici le senseur ζ_e peut être un de ceux présentés section 4.11. Sur des maillages réguliers, les opérateurs sont similaires aux opérateurs classiques. Ainsi on peut écrire :

$$A^{AV2} = \frac{\nu^{AV}}{h^2} (E - 2 + E^{-1}) \quad (5.58)$$

$$A^{AV4} = -\frac{\kappa^{AV}}{h^4} (E^2 - 4E + 6 - 4E^{-1} + E^{-2}) \quad (5.59)$$

où A^{AV2} et A^{AV4} sont respectivement les symboles de la viscosité artificielle d'ordre 2 et d'ordre 4.

Associés à un avancement temporel d'Euler aval, on peut introduire des critères de stabilité (par analogie avec le critère de Fourier). L'analyse monodimensionnelle de Von Neumann prédit, que l'opérateur de viscosité d'ordre 2 est stable si : $0 \leq \epsilon^{(2)} \zeta_j \leq 2$. De même, pour la viscosité d'ordre 4, on assure la stabilité pour : $\epsilon_j^{(4*)} \leq 0.496$. D'un point strictement quantitatif, ces critères n'ont pas une grande valeur pour des applications dans des géométries complexes avec des maillages tri-dimensionnels, non structurés et très irréguliers. Néanmoins, ils rappellent que **la viscosité artificielle peut rendre un calcul instable** ! Cette assertion est particulièrement valable pour l'hyperviscosité. Il n'est pas rare qu'un utilisateur, cherchant à amortir des *wiggles*, les amplifie au contraire en ayant imposé une valeur $\epsilon^{(4)}$ trop importante.

Expériences numériques

On reprend le cas test de convection en ajoutant ici les opérateurs de viscosité artificielle. On présente les résultats obtenus avec AVBP sur un cas de convection linéaire d'un saut de scalaire en forme de créneau (ici le scalaire est la densité de particules) réalisé avec le schéma TTGC avec un CFL très faible ($\nu_{acous} = 0.7$ et $\tilde{u}_p = 1m/s$). Le résultat de référence est celui obtenu sans ajouter de viscosité artificielle ("No A.V" sur la figure 5.33). Quatre tests sont effectués : on ajoute dans le premier de la viscosité d'ordre 2, dans le second de la viscosité d'ordre 4 et pour les deux derniers tests une combinaison des deux.

Sans viscosité, il est clair que le résultat est très peu satisfaisant (figure 5.33). Malgré les nombreuses qualités du schéma qu'on a énumérées tout au long de ce chapitre, la présence des hautes fréquences, dans le spectre de la condition initiale, se traduit par de nombreuses oscillations dans la solution, du fait de l'erreur de phase du schéma (pourtant globalement faible). Le principe du maximum n'est pas respecté par TTGC (ni pour les maxima, ni pour les minima) comme l'indiquent les figures 5.34 et 5.35.

Il convient de préciser que ce type de conditions initiales en créneau est à éviter, autant que possible. Si en revanche, on désire absolument les employer ou si l'écoulement lui-même créé cette forme de signal (ce qui peut se produire dans le cas de la phase dispersée), alors l'ajout de viscosité artificielle permet de lisser le créneau (gradients plus doux). Après un tour, la créneau a la forme d'une gaussienne et le maximum a diminué de manière sensible (figure 5.33). On note que la viscosité artificielle d'ordre 2 seule donne ici un meilleur résultat que les autres combinaisons possibles. La viscosité d'ordre 4 a, en effet, tendance à augmenter l'amplitude des oscillations, de part et d'autre de la gaussienne, comme on le voit sur la figure 5.33. Cela confirme, *a posteriori*, le risque que peut engendrer l'utilisation d'hyperviscosité artificielle. La différence entre les deux tests, dans lesquels sont activés les 2 opérateurs de viscosité, vient de la définition $\epsilon^{(4*)}$. Dans le premier cas, la définition (4.124) est utilisée comme le préconisent Jameson et al. [?]. Dans le second, on utilise directement $\epsilon^{(4*)} = \epsilon^{(4)}$.

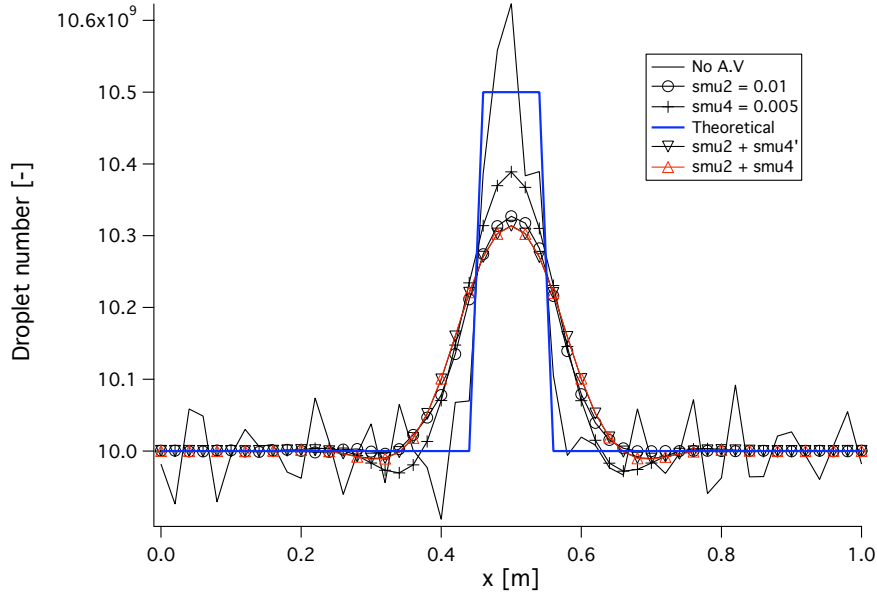


FIG. 5.33 - Convection d'une distribution scalaire en créneau. Le résultat est obtenu après 1 tour avec le schéma TTGC.

Les figures 5.34 et 5.35 mettent en évidence un phénomène qui peut s'avérer préoccupant quand on considère des scalaires passifs ou la phase dispersée : le principe du maximum n'est pas respecté, lors des convections de signaux de forme créneau avec viscosité artificielle, dans cette expérience, bien que cette violation ne soit pas très sensible. Il est sans doute possible d'assurer que la solution reste théoriquement bornée entre les limites fixées par la solution initiale (et la physique !), mais au détriment de l'erreur de dissipation qui est déjà assez grande ici. Par ailleurs, bien que dans le cas présent les différences soient faibles, les cas tests en changeant la définition de $\epsilon^{(4*)}$ confirment les recommandations de Jameson et al. [?]. La viscosité artificielle d'ordre 4 doit être réduite, voire désactivée, lorsque la viscosité d'ordre 2 agit.

5.5 Conclusions et discussions

5.5.1 Sur les schémas d'AVBP

Les analyses réalisées dans ce chapitre ont permis d'accroître la connaissance des schémas utilisés dans AVBP, et, en particulier, les schémas Taylor-Galerkin. Les relations de dispersion des schémas Taylor-Galerkin, ainsi que l'étude des nombres d'onde modifiés et des vitesses de groupe sont une démonstration de leurs excellentes performances en terme de dispersion, très comparable à un schéma de Padé d'ordre 6, réputé pour avoir de grandes qualités en terme de résolution spectrale. Les schémas classiques et totalement explicites en espace sont nettement distancés, même lorsqu'ils sont d'ordre plus élevé. Tous ces résultats font des schémas TTG de très bons candidats pour la LES.

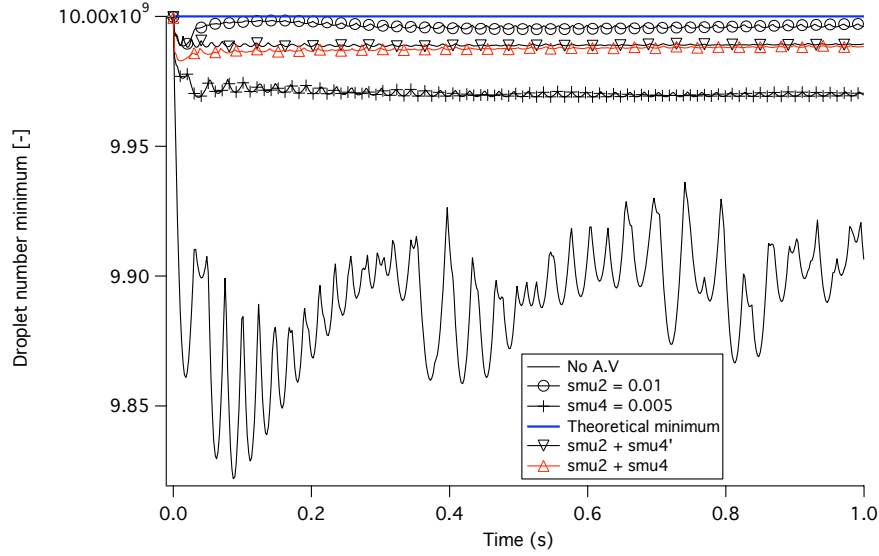


FIG. 5.34 - Evolution temporelle des minima du scalaire convecté dans les différents cas.

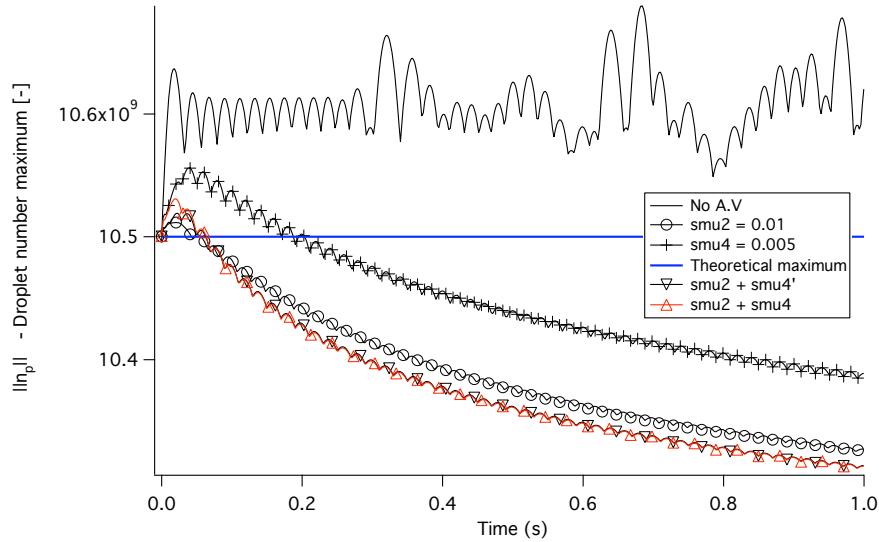


FIG. 5.35 - Evolution temporelle des maxima du scalaire convecté dans les différents cas.

En ce qui concerne les erreurs de diffusion, les conclusions sont plus contrastées. Les schémas Taylor-Galerkin (excepté TTGC) sont dissipatifs aux hautes fréquences, ce qu'on cherche à éviter lorsqu'on réalise des LES (le modèle de sous-maille est censé assurer ce rôle). Sur des configurations simples, cela peut s'avérer problématique [?]. Le schéma TTGC, de par sa très faible diffusion, répond à ce problème. Le cas test du tourbillon est, à ce titre, une illustration concrète.

Il faut toutefois garder en mémoire le concept de dissipation au sens de Kreiss. Malgré le modèle de turbulence et l'opérateur de diffusion, l'absence de dissipation du schéma de convection aux hautes fréquences peut le rendre inutilisable. En présence de géométries complexes, la stabilité devient une question encore plus centrale et les *wiggles* encore plus nombreux. L'ajout de viscosité artificielle est généralement la réponse à bon nombre de ces problèmes. La question est alors : qui de la viscosité

artificielle ou de la viscosité numérique fera le travail le plus efficace ? Cette interrogation est sujette à controverses. L'auteur de ce manuscrit pense, sans pour autant avoir de preuve formelle et définitive, que c'est plutôt au schéma numérique d'assurer une certaine stabilité au calcul et d'éviter à l'utilisateur le jeu du réglage des paramètres $\epsilon^{(2)}$ et $\epsilon^{(4)}$ liés à la viscosité artificielle.

5.5.2 Sur leurs limitations concernant la résolution de la phase dispersée

Si les schémas numériques utilisés dans AVBP ont déjà fait leur preuve pour résoudre la phase porteuse [?, ?], il n'en est pas de même pour la phase dispersée, en particulier lorsque les modèles de mouvement décorrélé sont désactivés (ce qui est le cas sur toutes les simulations en configurations complexes à l'heure actuelle). Comme on l'a dit précédemment, un nuage de gouttes est composé d'entités incompressibles, mais son comportement global rappelle celui d'un fluide très compressible. Les gradients très importants (entre une zone d'accumulation de gouttes et une zone de vide, comme on peut en trouver entre deux tourbillons) peuvent être légion dans un écoulement turbulent. Comme on l'a déjà précisé, le choix d'utiliser les mêmes schémas que pour le gaz a posé de nombreux problèmes de stabilité [?, ?] dans le passé. Ainsi, l'emploi de viscosité artificielle est indispensable et dans des proportions bien plus importantes que pour le gaz, comme en témoignent le cas de convection d'un créneau et surtout le calcul en géométrie complexe qui suit. Comme on l'a montré dans ce chapitre, les schémas décentrés amont sont beaucoup plus robustes mais dissipent aussi assez fortement, bien que cette diffusion numérique ne se fasse que dans la direction de propagation (autre gros avantage par rapport à la viscosité artificielle).

5.5.3 Une voie de développement

On propose une solution qui apparaît prometteuse. On reprend le problème étudié au paragraphe 5.4.1, c'est-à-dire la convection d'une impulsion de scalaire passif de forme gaussienne ou en créneau (on ajoute une forme conique aussi). Le domaine est toujours bidimensionnel, carré de 1m de côté, périodique et la vitesse de convection est $\vec{c} = (1, 0)^T$. Les figures 5.36 à 5.38 montrent les résultats obtenus avec une formulation FCT (qu'on a évoquée section 4.7), PSI et LW, après 1 tour (le CFL est égal à 0,3). Le schéma FCT permet d'améliorer considérablement les problèmes de diffusion numérique des schémas amont, tout en assurant une grande robustesse et en restant positif. On peut l'exprimer de la manière suivante :

$$U_j^{n+1} = U_j^n + \Delta t \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \delta U_{j,e}^{n,(L)} + \underbrace{\Delta t \sum_{e \in \mathcal{D}_j} \alpha_e \left(\delta U_{j,e}^{n,(H)} - \delta U_{j,e}^{n,(L)} \right)}_{\text{contribution anti-diffusive}} \quad (5.60)$$

où $\delta U_{j,e}^{n,(L)}$ est la mise à jour temporelle issue d'un schéma amont positif (ici on a choisi PSI, on aurait pu prendre N) et $\delta U_{j,e}^{n,(H)}$ la mise à jour d'un schéma d'ordre élevé (ici on utilise LW). α_e a le rôle de limiteur et contrôle la contribution anti-diffusive afin d'éviter l'apparition d'un nouvel extremum dans la solution [?].

Comme on peut le constater sur les figures 5.36 à 5.38, la méthode FCT démontre un grand potentiel, combinant à la fois une dissipation assez faible et la positivité de la solution. Cela en fait un très bon

candidat pour les simulations Eulériennes d'écoulements diphasiques en géométrie complexe (maillages non structurés). Il faut toutefois l'adapter à un système d'équations, ce qui n'est pas une tâche aisée.

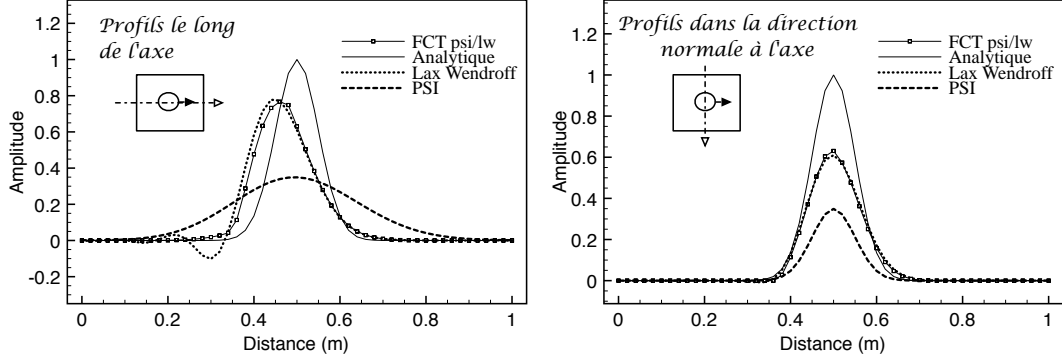


FIG. 5.36 - Profils de u_h après 1 tour complet. Le schéma FCT donne des résultats proches de LW, tout en étant positif. La solution initiale a une forme de gaussienne.

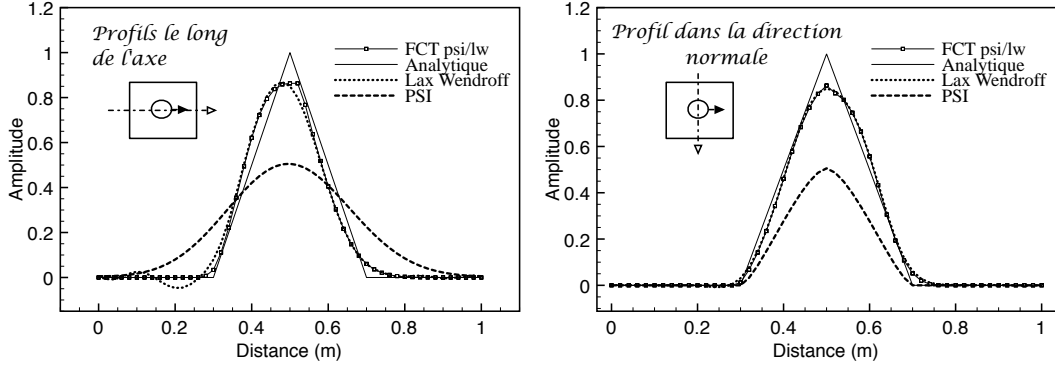


FIG. 5.37 - Profils de u_h après 1 tour complet. Le schéma FCT donne des résultats proches de LW, tout en étant positif. La solution initiale a une forme de triangle.

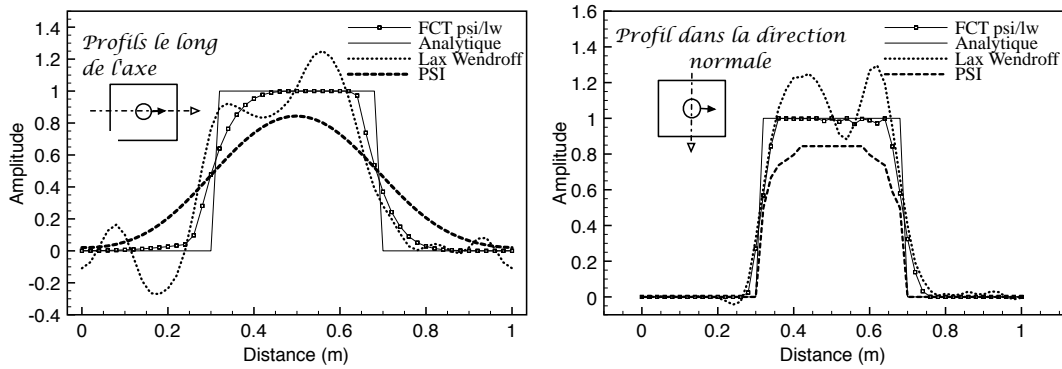


FIG. 5.38 - Profils de u_h après 1 tour complet. Le schéma FCT donne des résultats proches de LW, tout en étant positif. La solution initiale a une forme de créneau.

Chapitre 6

Analyse de stabilité théorique et pratique des schémas de convection d'AVBP sur des cas tests académiques - influence des conditions limites

Introduction

Dans le chapitre précédent, on a présenté une analyse des schémas numériques d'AVBP valable dans un domaine périodique ou infini. Or, en pratique, les chambres de combustion sont des domaines bornés et fermés, et l'influence des bords est loin d'être négligeable : ils peuvent dégrader considérablement la précision des résultats, dissiper excessivement ou même faire diverger totalement une méthode censée être stable [?].

Clairement, dès qu'on ajoute les bords du domaine, l'analyse numérique se complique fortement. La méthode de Von Neumann n'est plus applicable, il faut donc trouver un autre moyen pour quantifier l'erreur engendrée par un schéma et déterminer les conditions de stabilité.

Dans ce chapitre, on reprend le problème du mode acoustique, étudié section 5.4, mais cette fois-ci avec des bords (cavité acoustique monodimensionnelle), ce qui permet de présenter les différentes conditions limites et discrétisations de bord utilisables. On montre alors que certains couples peuvent rendre la méthode numérique instable et causer la divergence du calcul, ce que la méthode de Von Neumann, en domaine infini périodique, n'aurait pas permis de prédire. Par ailleurs, on met aussi en évidence un phénomène inquiétant : les schémas d'ordre élevé peuvent devenir moins précis globalement que les schémas *a priori* moins précis.

On introduit donc les principes de la méthode de la matrice d'amplification, ainsi que son lien avec la méthode de Von Neumann, lorsque le domaine étudié est périodique. En appliquant la méthode de la matrice aux schémas d'AVBP, on met ainsi en évidence les raisons de la divergence des calculs et les couples conditions limites - schémas de bord les plus satisfaisants. On fournit alors ce qui semblent être

les raisons pour lesquelles les schémas d'ordre élevé sont moins précis et on propose une solution pour remédier au problème, en utilisant la matrice d'amplification.

On rappelle que les schémas de convection, qu'on étudie ici, sont construits à partir de la méthode de Lax-Wendroff (ou Taylor-Galerkin), ce qui fait apparaître des dérivées spatiales d'ordre 2 (voir section 4.4). Pour les noeuds de bords, ces dérivées d'ordre 2 se décomposent en deux parties (voir équation (4.134)) : la première $\mathbf{LL}_j^0(\mathbf{U}^n)$ provient de l'intérieur du domaine de calcul et la seconde $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}^n)$ est liée à la frontière $\partial\Omega$ avec l'extérieur. On peut traiter la dérivée d'ordre 2 de deux manières, comme présenté section 4.12 :

- **Formulation USOT** : On annule le terme $\mathbf{BT}_j(\mathbf{U}^n)$ pour le noeud de bord.
- **Formulation CSOT** : Toute la contribution liée aux dérivées spatiales d'ordre 2 est annulée pour le noeud de bord. Cela revient à dire que l'intégration temporelle au bord est du type Euler explicite et la discrétisation spatiale est décentrée d'ordre 1.

6.1 Cavité acoustique 1D

6.1.1 Présentation du problème

Le problème¹ présenté ici est similaire au cas périodique (air au repos, pression et température ambiantes) décrit dans le chapitre 6 mais des murs ont été ajoutés de part et d'autre du domaine. Afin de garder un nombre de point par longueur d'onde similaire, on choisit $N_h = 15$ (soit $N = 14$). On étudie l'évolution temporelle du premier mode acoustique (demi-onde) d'une cavité monodimensionnelle. Le point de mesure de la pression se situe au bord et la figure 6.1 présente le problème étudié.

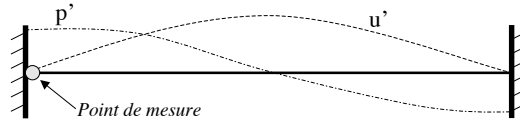


FIG. 6.1 - Schéma de présentation du problème de la cavité acoustique monodimensionnelle.

Le champ initial de vitesse est le suivant :

$$u' = \frac{\mathcal{A}}{\bar{\rho}c} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad \text{et} \quad L = 1 \text{ m}, \mathcal{A} = 100 \text{ Pa.}$$

La pression est constante et égale à $\bar{p} = 1\text{bar}$ à $t = 0$.

Ce cas académique est réalisé afin de fournir des réponses aux questions suivantes :

1. Quelle est l'influence des bords sur la stabilité et la précision ?
2. Quel type de condition limite faut-il utiliser ?
3. Quelle importance a le choix des termes de bord et la précision des dérivées ?

Pour répondre à ces questions, on utilisera les schémas numériques LW et TTGC avec deux types de fermeture des termes de bords et deux types de conditions limites pour modéliser les parois de la cavité. Les cas étudiés sont répertoriés dans le tableau 6.1.1.

¹Ce travail a été effectué en collaboration avec Mauro Porta.

Cas	Schéma	Fermeture aux bords	Conditions limites
LW-A	LW	USOT	Dirichlet
LW-B	LW	CSOT	Dirichlet
LW-C	LW	USOT	NSCBC
LW-D	LW	CSOT	NSCBC
TTGC-A	TTGC	USOT	Dirichlet
TTGC-B	TTGC	CSOT	Dirichlet
TTGC-C	TTGC	USOT	NSCBC
TTGC-D	TTGC	CSOT	NSCBC

TAB. 6.1 - Différents cas et paramètres utilisés pour l'étude du mode acoustique dans la cavité monodimensionnelle.

6.1.2 Résultats avec le code AVBP

Lax-Wendroff

Les figures 6.2 et 6.3 présentent la variation de la pression au point de mesure indiqué sur la figure 6.1.

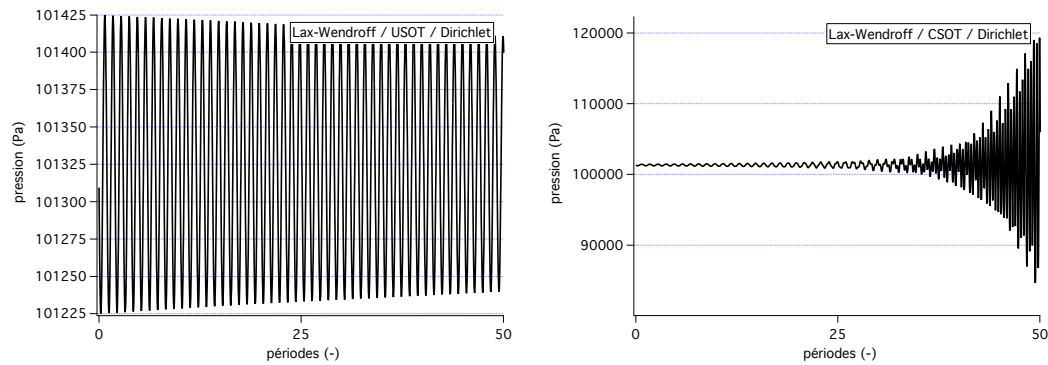


FIG. 6.2 - Variation temporelle de la pression dans la cavité (condition limite de type Dirichlet). A gauche : cas LW-A. A droite : cas LW-B.

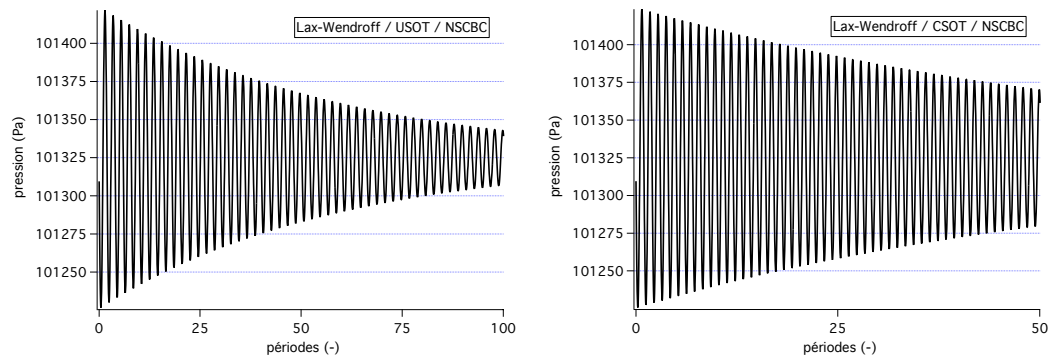


FIG. 6.3 - Variation temporelle de la pression dans la cavité (condition limite de type NSCBC). A gauche : cas LW-C. A droite : cas LW-D.

On peut faire les remarques suivantes :

- les résultats obtenus avec les conditions caractéristiques sont plus dissipés dans le temps que leurs homologues avec conditions de Dirichlet.
- le couple CSOT / Dirichlet est très instable et, par conséquent, ne peut être utilisé pour une simulation numérique.
- les solutions "avec bords" sont globalement plus dissipées que les résultats obtenus sur un domaine périodique.

La différence en termes de dissipation entre conditions de Dirichlet et conditions caractéristiques peut s'expliquer de la manière suivante : les dérivées aux bords sont traitées avec des approximations d'ordre 1 en espace. Pour une condition de Dirichlet, la valeur de la vitesse au bord est fixée, les autres variables sont libres et donc avancées en temps, grâce aux dérivées et résidus, précis à l'ordre 1. Dans le cas du traitement caractéristique, la vitesse n'est pas fixée. Elle est traitée (ainsi que l'énergie totale, pour la pression) avec des variations caractéristiques (cf. section 4.12), utilisant les gradients aux bords, donc précises à l'ordre 1. Au final, il y a donc plus d'approximations d'ordre faible intervenant dans les calculs avec les conditions caractéristiques, ce qui peut expliquer la dissipation plus importante. Le même raisonnement est valable pour le cas périodique, celui-ci est moins dissipé car aucune approximation d'ordre 1 en espace n'est utilisée dans le calcul.

On peut aussi fournir une raison de l'erreur très importante générée dans le cas LW-B. En utilisant le modèle CSOT, on supprime la contribution LW, c'est-à-dire les dérivées spatiales d'ordre 2 (cf. section 4.12). La conséquence est d'obtenir, de chaque côté, une intégration temporelle de type Euler explicite et des schémas décentrés. Selon l'onde acoustique considérée, ces schémas décentrés sont tantôt amont, tantôt aval. Or, un schéma aval est inconditionnellement instable, ce qui entraîne vraisemblablement la déstabilisation observée dans le calcul quand $t \rightarrow \infty$.

TTGC

On procède à la même analyse avec le schéma TTGC. Les figures 6.4 et 6.5 présentent la variation de la pression au même point de mesure.

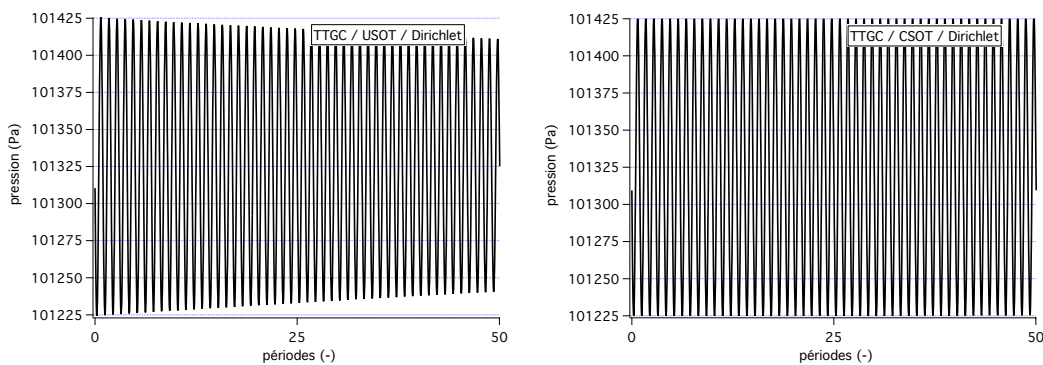


FIG. 6.4 - Variation temporelle de la pression dans la cavité (condition limite de type Dirichlet). A gauche : cas TTGC-A. A droite : cas TTGC-B.

Les mêmes remarques que pour les cas LW-A,B,C,D s'appliquent ici pour le schéma TTGC. Certaines peuvent être ajoutées également :

- La dissipation est plus importante pour le schéma TTGC que pour le schéma LW, ce qui est en opposition avec tout ce qui a été dit et démontré, dans les chapitres précédents, pour les cas pério-

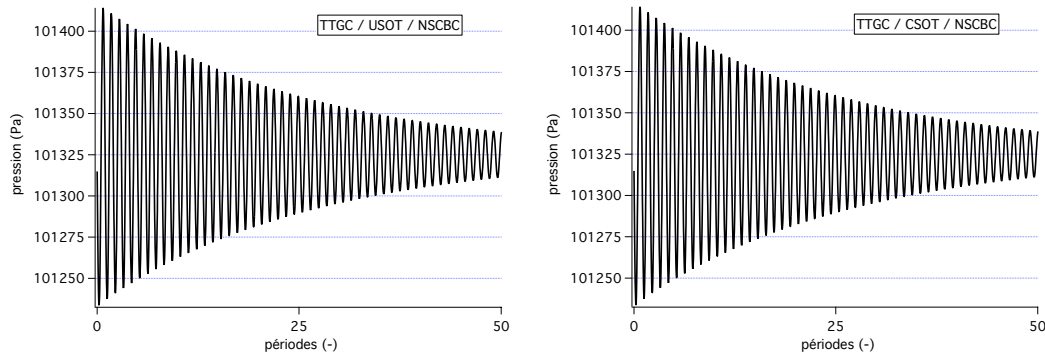


FIG. 6.5 - Variation temporelle de la pression dans la cavité (condition limite de type NSCBC). A gauche : cas TTGC-C. A droite : cas TTGC-D.

diques.

- Bien que semblant marginalement stable (pas de dissipation), le cas TTGC-B est bel et bien instable, le taux de croissance est strictement supérieur à 1.

Le schéma TTGC est plus dissipatif, dans cette configuration, que le schéma LW, pour les mêmes raisons que la condition NSCBC l'est plus que la condition de Dirichlet. En effet, le schéma TTGC est calculé en deux fois (prédiction puis correction) et les conditions limites sont appliquées aux deux étapes. Ceci entraîne que le nombre d'approximations d'ordre faible utilisées pour une itération avec TTGC est deux fois plus grand que pour LW. Il n'est donc pas étonnant d'obtenir ce résultat.

Le peu de sensibilité de TTGC, au choix du terme de bord en comparaison de LW, est lié à la part que prend la dérivée d'ordre 2 dans le calcul du résidu. Compte tenu des coefficients utilisés devant les dérivées pour construire TTGC et de l'étude spectrale réalisée au chapitre 5, ce schéma est très peu dissipatif. L'avancement dépend, en effet, très peu des termes $\mathbf{L}\mathbf{L}_j(\mathbf{U}^n)$ et, par conséquent, du terme de bord. En comparaison, les mêmes tests ont été menés avec le schéma TTG4A, celui-ci dépendant beaucoup plus de $\mathbf{L}\mathbf{L}_j(\mathbf{U}^n)$, il est, de ce fait, encore plus instable que LW dans le cas CSOT / Dirichlet !

6.1.3 Différences entre les conditions limites

Type de traitement des murs adiabatiques

Les deux conditions limites simulant des murs adiabatiques sont censées faire la même chose : physiquement, il s'agit d'imposer une vitesse normale nulle et donc une réflexion totale d'une onde acoustique incidente². Les résultats sont pourtant bien différents, comme le montre les résultats du paragraphe 6.1.2. On va donc s'intéresser, plus précisément, au traitement des conditions limites, afin de déterminer quel choix est à préconiser. Pour ce faire, on étudie, en particulier, l'avancement temporel de l'équation de continuité au bord.

Condition de Dirichlet Comme on l'a évoqué dans le paragraphe 4.12, on utilise le schéma numérique pour modifier la masse volumique au bord et aucune modification n'est réalisée par la condition

²On étudie ici un cas isentropique

limite. Ceci revient à écrire :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial \rho u}{\partial x} = -\left(\underbrace{u \frac{\partial \rho}{\partial x}}_{\text{nul car } u=0} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} \right) = -\rho \frac{\partial u}{\partial x} \quad (6.1)$$

Traitement par ondes caractéristiques De la même manière, on écrit l'avancement de ρ par le traitement caractéristique. D'après [?] :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\left(\rho \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{c} \frac{\partial p}{\partial x} \right) \quad (6.2)$$

Yoo et Im [?] ont introduit la notion de "condition limite effective", afin de distinguer ce que le code résout et ce que la théorie physique prédit réellement. En effet, en théorie, sur un mur, $\frac{\partial p}{\partial x} = 0$ et les équations (6.1) et (6.2) sont équivalentes. En pratique, cela n'est pas le cas et le traitement des deux conditions limites est différent ! Le terme $\frac{1}{c} \frac{\partial p}{\partial x}$, nommé par Porta [?] "terme ABC" (pour *additional boundary correction*) a, comme on l'évoquera par la suite, un rôle stabilisateur donc très important.

Une remarque sur le choix de la formulation aux bords avec les conditions caractéristiques

On rappelle que le calcul des ondes peut être effectué suivant deux méthodologies (section 4.12). Un test simple mené par Porta [?] montre que le calcul des ondes effectué par le code est erroné, lorsque qu'on utilise la formulation USOT avec le traitement caractéristique temporel (type Thompson), souvent préféré pour les entrées (et *a fortiori* les murs caractéristiques). Les ondes sont, en effet, calculées à partir du résidu. On peut donc en conclure qu'avec la formulation USOT, le résidu est inexact. En revanche, si la formulation CSOT est adoptée, le calcul des ondes est exact.

Il est à noter que ce problème n'apparaît pas avec la formulation spatiale, puisque les ondes sont déterminées à partir des gradients (le résidu n'intervient pas).

6.2 Méthode de la matrice d'amplification

6.2.1 Principe

Cette méthode est applicable aux domaines périodiques (et fournit alors des informations équivalentes aux analyses Fourier ou de Von Neumann), mais elle devient intéressante dès lors qu'on considère des bords et les conditions limites. On présente le principe de cette méthode pour le schéma Lax-Wendroff appliqué à l'équation de convection linéaire monodimensionnelle (5.1) sur un domaine périodique (on a donc $U_0^n = U_N^n$). Le but est de construire la matrice d'amplification qu'on notera $[Q]$, afin de pouvoir écrire :

$$\{U^{n+1}\} = [Q]\{U^n\} \quad (6.3)$$

$\{U^n\}$ est le vecteur contenant l'ensemble des variables à la n-ième itération temporelle et :

$$\{U^n\} = (U_1^n, \dots, U_{j-1}^n, U_j^n, U_{j+1}^n, \dots, U_N^n)$$

En écrivant explicitement l'avancement temporel H du schéma étudié à chaque noeud j :

$$U_j^{n+1} = HU_j = \frac{1}{2}\nu(1+\nu)U_{j-1}^n + (1-\nu^2)U_j^n + \frac{1}{2}\nu(-1+\nu)U_{j+1}^n \quad (6.4)$$

On construit la matrice $[Q] \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ ligne après ligne. Pour la convection linéaire 1D résolue par le schéma LW sur un domaine périodique, on obtient :

$$[Q] = \begin{pmatrix} (1 - \nu^2) & \frac{1}{2}\nu(-1 + \nu) & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \frac{1}{2}\nu(1 + \nu) \\ \frac{1}{2}\nu(1 + \nu) & (1 - \nu^2) & \frac{1}{2}\nu(-1 + \nu) & 0 & \cdots & \cdots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \cdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \frac{1}{2}\nu(1 + \nu) & (1 - \nu^2) & \frac{1}{2}\nu(-1 + \nu) & 0 & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \frac{1}{2}\nu(1 + \nu) & (1 - \nu^2) & \frac{1}{2}\nu(-1 + \nu) \\ \frac{1}{2}\nu(-1 + \nu) & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{1}{2}\nu(1 + \nu) & (1 - \nu^2) \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

6.2.2 Etude de stabilité

Afin de déterminer les conditions de stabilité en norme L^2 de la méthode numérique, on étudie le spectre de la matrice $[Q]$. Une condition nécessaire³ de stabilité est :

$$\rho([Q]) \leq 1$$

En effet, on peut décomposer la solution initiale comme une combinaison linéaire des vecteurs propres de $[Q]$ soit :

$$\{U^0\} = \sum_{k=1}^N \alpha_k \{V\}_k$$

Pour un schéma stable et dissipatif, on note par convention les valeurs propres de $[Q]$ par décroissance :

$$1 = |\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots > |\lambda_m| \geq \cdots \geq |\lambda_k| \cdots \geq |\lambda_N|$$

ce qui signifie qu'on appellera λ_m la première valeur propre inférieure strictement à 1. Si le schéma est instable, λ_m sera la dernière valeur propre strictement inférieure à 1.

Après n itérations, n étant un entier suffisamment grand, on obtient, pour un schéma stable :

$$\begin{aligned} \{U^{n+1}\} &= [Q]\{U^n\} \\ &= [Q]^n\{U^0\} \\ &= \sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k \lambda_k^n \{V\}_k + \lambda_m^n \left(\alpha_m \{V\}_m + \sum_{k=m+1}^N \alpha_k \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_m} \right)^n \{V\}_k \right) \\ &= \underbrace{\sum_{k=1}^{m-1} \alpha_k^n \{V\}_k}_{\text{"solution stationnaire"}} + \lambda_m^n \alpha_m \{V\}_m + \cdots \end{aligned}$$

Le premier terme qu'on a désigné "solution stationnaire" correspond à la solution obtenue quand $n \rightarrow \infty$ car les valeurs propres correspondantes sont unitaires dans le cas stable. On notera que dans les tests étudiés par la suite (fluctuations acoustiques), ce terme sera nul (toujours dans le cas stable). Les termes en $\left(\frac{\lambda_k}{\lambda_m}\right)^n$ tendent vers 0 pour toute valeur propre λ_k strictement inférieure à λ_m . Ainsi, dans le cas d'un schéma stable, la solution est dissipée et le module de λ_m indique donc un taux de décroissance de la solution. En utilisant un raisonnement similaire pour un schéma instable, on utilisera la plus grande

³Sous certaines conditions de symétrie de $[Q]$, la norme L^2 et le rayon spectral sont égaux, la condition devient aussi suffisante. Le lecteur peut trouver des précisions dans [?] ou [?].

valeur propre pour déterminer le taux d'accroissement.

Comme le souligne Hirsch [?], les vecteurs propres, obtenus lors de l'étude d'un schéma sur un domaine périodique, correspondent aux $e^{2ij\pi/N}$ avec $0 \leq j \leq N - 1$, c'est-à-dire les modes utilisés dans l'analyse spectrale et les valeurs propres sont les coefficients d'amplification correspondants. Ainsi, le module des valeurs propres fournit un renseignement sur la dissipation introduite par le schéma et les erreurs de dispersion peuvent être déterminées à l'aide de l'argument.

6.2.3 En pratique...

Dans certains cas particuliers, comme la matrices périodique (6.5), il existe des théorèmes permettant de déterminer ou de majorer les valeurs propres de la matrice $[Q]$. Dans l'étude qui suit, néanmoins, trouver analytiquement les valeurs de $[Q]$ n'est pas envisageable. On a choisi de les déterminer à l'aide d'un code de calcul écrit sous SCILAB. Le domaine de stabilité est donc obtenu numériquement.

On précise enfin la construction d'une matrice d'amplification sur un domaine non périodique. Lorsque la condition limite imposée aux noeuds 0 et/ou N est de type Dirichlet, on supprime les lignes correspondant à ces noeuds, dans la matrice et dans le vecteur solution, car ce ne sont plus des degrés de liberté du problème.

6.3 Application aux schémas d'AVBP

6.3.1 Equations d'Euler linéarisées

Pour réaliser l'étude du mode acoustique dans une cavité monodimensionnelle, on part des équations d'Euler :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \quad (6.6)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \quad (6.7)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho E u}{\partial x} + \frac{\partial p u}{\partial x} = 0 \quad (6.8)$$

où ρ est la masse volumique, u la vitesse, p la pression et $E = e + 1/2 u^2$ l'énergie totale. On se place dans le cas d'un gaz parfait donc : $p = \rho r T$ avec T la température.

Par hypothèse, on considère l'écoulement isentropique et que $\bar{u} = 0$. Après linéarisation autour de l'état stationnaire (toute grandeur se décompose de la manière suivante : $X(x, t) = \bar{X} + X'(x, t)$), on obtient :

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \bar{\rho} \frac{\partial u'}{\partial x} = 0 \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial u'}{\partial t} + \frac{c^2}{\bar{\rho}} \frac{\partial \rho'}{\partial x} = 0 \quad (6.10)$$

où $c^2 = \frac{p'}{\rho'}$ est la vitesse du son.

Pour la suite, **on s'affranchira de l'exposant X'** pour alléger quelque peu les notations. En revanche, on garde les barres \bar{X} pour désigner l'état stationnaire.

6.3.2 Discrétisation au centre du domaine

On applique la méthode de Lax-Wendroff telle qu'on l'a décrite chapitre 4 au vecteur $\mathbf{U} = (\rho, u)^T$. Le développement en temps autour de $t = t^n$ est donné par :

$$\rho^{n+1} = \rho^n + \Delta t \left. \frac{\partial \rho}{\partial t} \right|^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left. \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} \right|^n + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (6.11)$$

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|^n + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (6.12)$$

En utilisant les équations (6.9) et (6.10) dans (6.11) et (6.12), on obtient :

$$\rho_i^{n+1} \simeq \rho_i^n - \bar{\rho} \Delta t \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i^n + \frac{1}{2} c^2 \Delta t^2 \left. \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \right|_i^n \quad (6.13)$$

$$u_i^{n+1} \simeq u_i^n - \frac{c^2}{\bar{\rho}} \Delta t \left. \frac{\partial \rho}{\partial x} \right|_i^n + \frac{1}{2} c^2 \Delta t^2 \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i^n \quad (6.14)$$

ce qui donne après discrétisation spatiale suivant la méthode *cell-vertex*⁴ :

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \frac{\bar{\rho} \Delta t}{h} \Delta_0 U_i^n + \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} \delta^2 \rho_i^n \quad (6.15)$$

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} h} \Delta_0 \rho_i^n + \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} \delta^2 U_i^n \quad (6.16)$$

On écrit la matrice pour le système d'équations (6.13)-(6.14). On choisit d'écrire le vecteur solution de la manière suivante :

$$\{\mathbf{U}\} = (\rho_0, U_0, \dots, \rho_{j-1}, U_{j-1}, \rho_j, U_j, \rho_{j+1}, U_{j+1}, \dots, \rho_N, U_N)^T$$

ce qui donne pour le schéma au centre du domaine de calcul :

$$[\mathbf{Q}]_c = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & \frac{\bar{\rho} \Delta t}{2h} & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho} \Delta t}{2h} & 0 & \dots & \dots \\ 0 & \frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & \dots & \dots \\ \dots & 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & \frac{\bar{\rho} \Delta t}{2h} & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho} \Delta t}{2h} & 0 & \dots \\ \dots & 0 & \frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & 0 & \frac{\bar{\rho} \Delta t}{2h} & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho} \Delta t}{2h} & -\frac{\bar{\rho} \Delta t}{2h} & 0 \\ \dots & \dots & 0 & \frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

⁴Pour ρ , on ne fait aucune distinction typologique entre la solution des équations (6.9)-(6.10) et les variables discrètes.

Il reste maintenant à remplir les lignes du haut et du bas, c'est-à-dire prendre en compte les schémas de bord et les conditions limites. On peut, par ailleurs, noter que la matrice du schéma de centre peut s'écrire :

$$[\mathbf{Q}]_c = [\mathbf{Q}]_{CV} + [\mathbf{Q}]_{LW}$$

où $[\mathbf{Q}]_{CV}$ est la matrice d'amplification pour le schéma aux différences centrées d'ordre 2 et $[\mathbf{Q}]_{LW}$ représente la contribution Lax-Wendroff.

6.3.3 Conditions limites et termes de bord

On présente la construction de la matrice $[\mathbf{Q}]$ pour deux types de schémas de bord et deux formulations de la condition limite "mur". Celle-ci s'écrit comme la somme des contributions du centre du domaine et des bords.

$$[\mathbf{Q}] = [\mathbf{Q}]_c + [\mathbf{Q}]_b \quad (6.18)$$

où la matrice $[\mathbf{Q}]_c$ contient les composantes pour le schéma partout dans le domaine de calcul, sauf aux bords (ou on remplace par des lignes de zéros). La matrice $[\mathbf{Q}]_b$ est remplie de zéros sauf aux premières et dernières lignes. Elle contient les informations relatives aux schémas de bords et aux conditions limites. Dans les cas avec conditions limites de type Dirichlet $u' = 0$, on supprime U_0 et U_N du vecteur solution car ce ne sont plus des degrés de liberté. On a alors $[\mathbf{Q}] \in \mathcal{M}_{2N}(\mathbb{R})$.

Pour les cas avec conditions limites caractéristiques, on garde toutes les composantes du vecteur solution, comme on va le voir. Ainsi on a $[\mathbf{Q}] \in \mathcal{M}_{2N+2}(\mathbb{R})$.

Schéma de bord pour les dérivées du premier ordre

Le noeud de bord à gauche (*resp. à droite*) n'a pas de voisin à sa gauche (*resp. à droite*), ce qui oblige à exprimer $\frac{\partial}{\partial x}$ à l'aide de différences décentrées. Ainsi, on a pour :

- En $x = 0$: décentrement aval

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_0 \approx \frac{U_1 - U_0}{h}$$

- En $x = 1$: décentrement amont

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_N \approx \frac{U_N - U_{N-1}}{h}$$

et le même type d'approximations s'applique à ρ .

Termes de bord pour la dérivée d'ordre 2

On teste ici les deux types de fermeture présentés section 4.12 pour la dérivée seconde. Les valeurs "prédites" au bord par le schéma numérique sont donc les suivantes :

- *CSOT* : On annule complètement la contribution due au schéma LW pour le noeud du bord (ce qui revient à avoir une intégration temporelle de type Euler). Il n'y a plus de dérivée seconde aux

bords, ce qui donne pour les noeuds concernés (en prenant la densité comme exemple) :

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{jb} \simeq 0 \quad (6.19)$$

$$\rho_{jb}^{n+1} \simeq \rho_{jb}^n - \bar{\rho} \Delta t \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{jb}^n \quad (6.20)$$

où l'indice jb est égal à 0 ou à N .

- *USOT* : Le terme de bord est nul. Ainsi l'expression de la dérivée seconde aux bords est la suivante (Attention, le volume de contrôle d'un noeud de bord est $h/2$, d'où le facteur 2) :

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_0 \approx 2 \frac{U_1 - U_0}{h^2} \quad (6.21)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_N \approx 2 \frac{U_{N-1} - U_N}{h^2} \quad (6.22)$$

Condition de type Dirichlet

Compte tenu du problème étudié, la condition limite dans le cas Dirichlet s'écrit :

$$U_0^n = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}^* \quad (6.23)$$

$$U_N^n = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}^* \quad (6.24)$$

$$\rho_{0,C}^{n+1} = \rho_{0,P}^{n+1} \quad (6.25)$$

$$\rho_{N,C}^{n+1} = \rho_{N,P}^{n+1} \quad (6.26)$$

où l'indice P fait référence à la valeur prédite par le schéma numérique et l'indice C correspond à la valeur corrigée par la condition limite.

Condition caractéristique - NSCBC

On peut réécrire le système (6.9) et (6.10) sous la forme matricielle :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \underline{\mathbf{A}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (6.27)$$

et la matrice jacobienne $\underline{\mathbf{A}}$ est la suivante :

$$\underline{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{\rho} \\ \frac{c^2}{\bar{\rho}} & 0 \end{pmatrix}$$

Le calcul des valeurs propres de la jacobienne donne :

$$\lambda_+ = +c \quad , \quad \lambda_- = -c$$

avec respectivement pour vecteur propre à gauche associé :

$$\mathbf{l}_+ = (1, \frac{\bar{\rho}}{c}) \quad , \quad \mathbf{l}_- = (1, -\frac{\bar{\rho}}{c})$$

Les ondes acoustiques s'écrivent donc :

$$\mathcal{L}_+ = c \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\bar{\rho}}{c} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (6.28)$$

$$\mathcal{L}_- = -c \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\bar{\rho}}{c} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (6.29)$$

Ainsi l'onde \mathcal{L}_+ (*resp.* \mathcal{L}_-) est l'onde acoustique se dirigeant vers les x positifs (*resp.* négatifs). En utilisant la méthodologie NSCBC, on peut réécrire (6.27) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + d_1 = 0 \quad (6.30)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + d_2 = 0 \quad (6.31)$$

où :

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\mathcal{L}_+ + \mathcal{L}_-) \\ \frac{c}{2\bar{\rho}}(\mathcal{L}_+ - \mathcal{L}_-) \end{pmatrix}$$

La condition de mur se traduit alors par : $\mathcal{L}_+ = \mathcal{L}_-$, ce qui revient à dire que l'onde acoustique entrant dans le domaine Ω est égale à l'onde sortante (réflexion acoustique totale). Les équations (6.30) et (6.31) deviennent alors :

– En $x = 0$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathcal{L}_- = 0 \quad (6.32)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 0 \quad (6.33)$$

– En $x = 1$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathcal{L}_+ = 0 \quad (6.34)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 0 \quad (6.35)$$

6.3.4 Discrétisations aux bords

On explicite maintenant l'écriture des matrices $[\mathbf{Q}]_b$ pour les différents couples schémas de bord / conditions limites.

CSOT + Dirichlet

Le vecteur solution s'écrit :

$$\{\mathbf{U}\} = (\rho_0, \rho_1, U_1, \dots, \rho_{N-1}, U_{N-1}, \rho_N)^T.$$

En tenant compte des conditions limites sur u , on a les schémas de bord suivant :

A gauche :

$$\rho_0^{n+1} = \rho_0^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h}(U_1^n - U_0^n) \quad (6.36)$$

$$\rho_1^{n+1} = \rho_1^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{2h}(U_2^n - U_0^n) + \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} (\rho_2^n - 2\rho_1^n + \rho_0^n) \quad (6.37)$$

$$U_1^{n+1} = U_1^n - \frac{c^2 \Delta t}{2\rho h}(\rho_2^n - \rho_0^n) + \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} (U_2^n - 2U_1^n + U_0^n) \quad (6.38)$$

A droite :

$$\rho_{N-1}^{n+1} = \rho_{N-1}^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{2h}(U_N^n - U_{N-2}^n) + \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} (\rho_N^n - 2\rho_{N-1}^n + \rho_{N-2}^n) \quad (6.39)$$

$$U_{N-1}^{n+1} = U_{N-1}^n - \frac{c^2 \Delta t}{2\rho h}(\rho_N^n - \rho_{N-2}^n) + \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} (U_N^n - 2U_{N-1}^n + U_{N-2}^n) \quad (6.40)$$

$$\rho_N^{n+1} = \rho_1^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h}(U_N^n - U_{N-1}^n) \quad (6.41)$$

On obtient alors la matrice pour les bords :

$$[\mathbf{Q}]_b = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho}\Delta t}{2h} & 0 & \dots & 0 \\ \frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & 0 & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & \frac{\bar{\rho}\Delta t}{2h} & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} \\ 0 & \dots & 0 & \frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} & \frac{1}{2} \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & 0 & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{c^2 \Delta t}{\bar{\rho} 2h} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & 1 \end{pmatrix} \quad (6.42)$$

USOT + Dirichlet

Le vecteur solution est le même que précédemment, c'est-à-dire qu'il ne contient ni U_0 , ni U_N . Par rapport au schéma précédent, seules les équations (6.36) et (6.41) sont modifiées. Elles s'écrivent alors :

A gauche :

$$\rho_0^{n+1} = \rho_0^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h}(U_1^n - U_0^n) + \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2}(\rho_1^n - \rho_0^n) \quad (6.43)$$

A droite :

$$\rho_N^{n+1} = \rho_1^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h}(U_N^n - U_{N-1}^n) + \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2}(\rho_{N-1}^n - \rho_N^n) \quad (6.44)$$

La matrice d'amplification des schémas de bord est identique à la matrice (6.42), à l'exception de la première et de la dernière ligne.

$$[\mathbf{Q}]_b = \begin{pmatrix} 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} & \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & 1 - \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} \end{pmatrix} \quad (6.45)$$

CSOT + NSCBC

On s'intéresse désormais au cas des conditions limites de type caractéristique. Le vecteur solution contient ici toutes les inconnues du problème et s'écrit :

$$\{\mathbf{U}\} = (\rho_0, U_0, \rho_1, U_1, \dots, \rho_{N-1}, U_{N-1}, \rho_N, U_N)^T.$$

Seules les deux premières (ρ_0, U_0) et les deux dernières lignes (ρ_N, U_N) sont traitées dans $[\mathbf{Q}]_b$.

La discrétisation à gauche s'écrit :

$$\rho_0^{n+1} = \rho_0^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h}(U_1^n - U_0^n) + \frac{c\Delta t}{h}(\rho_1^n - \rho_0^n) \quad (6.46)$$

$$U_0^{n+1} = U_0^n \quad (6.47)$$

La discrétisation à droite s'écrit :

$$\rho_N^{n+1} = \rho_N^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h}(U_N^n - U_{N-1}^n) - \frac{c\Delta t}{h}(\rho_N^n - \rho_{N-1}^n) \quad (6.48)$$

$$U_N^{n+1} = U_N^n \quad (6.49)$$

On obtient alors la matrice :

$$[\mathbf{Q}]_b = \begin{pmatrix} 1 - \frac{c\Delta t}{h} & \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & \frac{c\Delta t}{h} & -\frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{c\Delta t}{h} & \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & 1 - \frac{c\Delta t}{h} & -\frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.50)$$

USOT + NSCBC

Le vecteur solution contient encore toutes les inconnues du problème et s'écrit :

$$\{\mathbf{U}\} = (\rho_0, U_0, \rho_1, U_1, \dots, \rho_{N-1}, U_{N-1}, \rho_N, U_N)^T.$$

Seules les deux premières (ρ_0, U_0) et les deux dernières lignes (ρ_N, U_N) sont traitées dans $[\mathbf{Q}]_b$.

La discrétisation à gauche s'écrit :

$$\rho_0^{n+1} = \rho_0^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h}(U_1^n - U_0^n) + \frac{c\Delta t}{h}(\rho_1^n - \rho_0^n) + \frac{c^2\Delta t^2}{h^2}(\rho_1^n - \rho_0^n) \quad (6.51)$$

$$U_0^{n+1} = U_0^n \quad (6.52)$$

La discrétisation à droite s'écrit :

$$\rho_N^{n+1} = \rho_N^n - \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h}(U_N^n - U_{N-1}^n) - \frac{c\Delta t}{h}(\rho_N^n - \rho_{N-1}^n) + \frac{c^2\Delta t^2}{h^2}(\rho_{N-1}^n - \rho_N^n) \quad (6.53)$$

$$U_N^{n+1} = U_N^n \quad (6.54)$$

On obtient alors la matrice :

$$[\mathbf{Q}]_b = \begin{pmatrix} 1 - \frac{c\Delta t}{h} - \frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & \frac{c\Delta t}{h} + \frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{c\Delta t}{h} + \frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & \frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} & 1 - \frac{c\Delta t}{h} - \frac{c^2\Delta t^2}{h^2} & -\frac{\bar{\rho}\Delta t}{h} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.55)$$

6.4 Résultats et comparaisons avec AVBP

La matrice d'amplification peut être utilisée comme un outil d'analyse permettant l'étude *a priori* des schémas numériques, avec ou sans les conditions limites. Ici, on ne montre pas les résultats obtenus pour les cas périodiques, car les valeurs propres de la matrice n'apportent pas de renseignement supplémentaire, par rapport à l'étude du coefficient d'amplification. On présente donc les résultats avec conditions limites.

6.4.1 Conditions de Dirichlet

La figure 6.6 présente les valeurs propres des matrices d'amplification du schéma LW avec conditions limites de type Dirichlet dans le plan complexe. Le disque de rayon 1, ayant pour centre l'origine, indique les limites de stabilité. Comme le montre le zoom en bas à gauche de la figure 6.6, certaines valeurs propres sont de module supérieur à 1 dans le cas LW-B, ce qui explique pourquoi on observe une divergence de la pression. Plusieurs calculs à différents CFL tendent d'ailleurs à faire penser que la combinaison CSOT+Dirichlet est instable inconditionnellement.

La figure 6.7 fournit une comparaison entre la pression dans AVBP et le taux de décroissance théorique, égal au module de la valeur propre λ_m pour le cas LW-A et indique la croissance de l'instabilité numérique dans le cas LW-B. On peut donc constater que la méthode de la matrice permet de retrouver les taux de décroissance et croissance de la pression d'AVBP, dans les deux cas.

6.4.2 Conditions caractéristiques

On reproduit les mêmes comparaisons dans le cas où les conditions limites sont caractéristiques.

La figure 6.8 indique où se trouvent les valeurs propres des matrices d'amplification des cas LW-C et D dans le plan complexe. Comme on peut le voir, d'une manière globale, les valeurs propres du cas C (USOT) ont des modules légèrement inférieurs à celles du cas D (CSOT), en particulier λ_m . Il n'est donc pas étonnant, en voyant la figure 6.9, que le cas C soit plus dissipé.

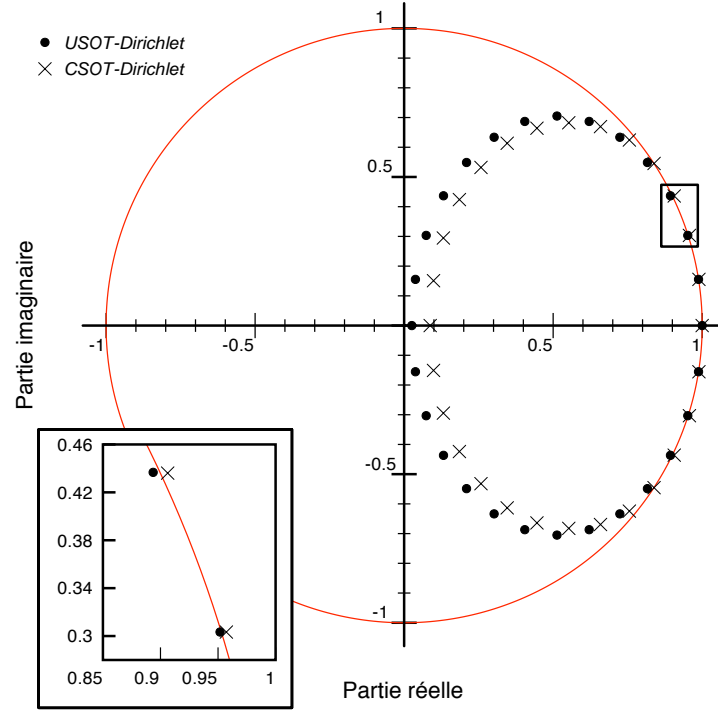


FIG. 6.6 - Parties réelles et imaginaires des valeurs propres λ_k de la matrice d'amplification $[Q]$ pour les conditions limites de type Dirichlet (• : LW-A ; × : LW-B).

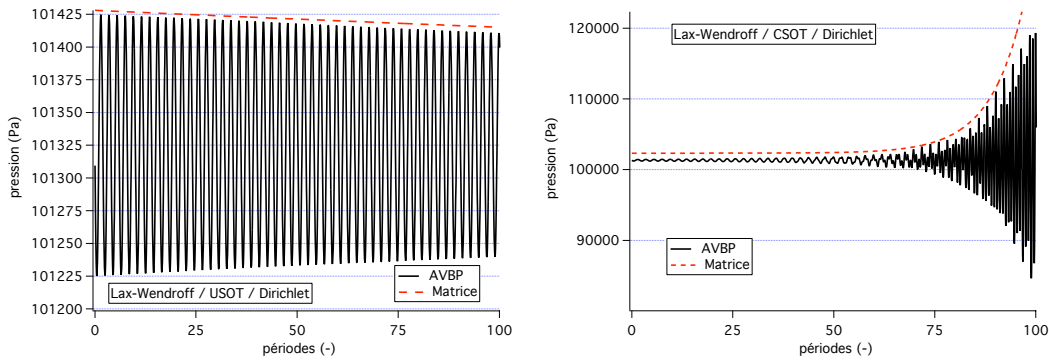


FIG. 6.7 - Comparaison entre la variation de pression fournie par AVBP et le taux de variation indiqué par la méthode de la matrice. A gauche : cas LW-A. A droite : cas LW-B.

On a, de plus, cherché à mettre en évidence l'utilité du terme ABC évoqué à la section 6.1 (on rappelle qu'il s'agit du terme faisant intervenir la dérivée de la densité, théoriquement nulle) et apparaissant sous la forme de $\pm \frac{\bar{\rho} \Delta t}{h} (\rho_{1/N}^n - \rho_{0/N-1}^n)$ dans le calcul de $\rho_{0/N}^{n+1}$. Pour ce faire, on a calculé les valeurs de la matrice du cas CSOT + NSCBC sans ce terme. Le résultat obtenu est alors similaire au cas CSOT+DIRIC, c'est-à-dire plusieurs valeurs propres de modules supérieurs à 1. Le terme ABC a donc un rôle prépondérant puisqu'il stabilise le calcul.

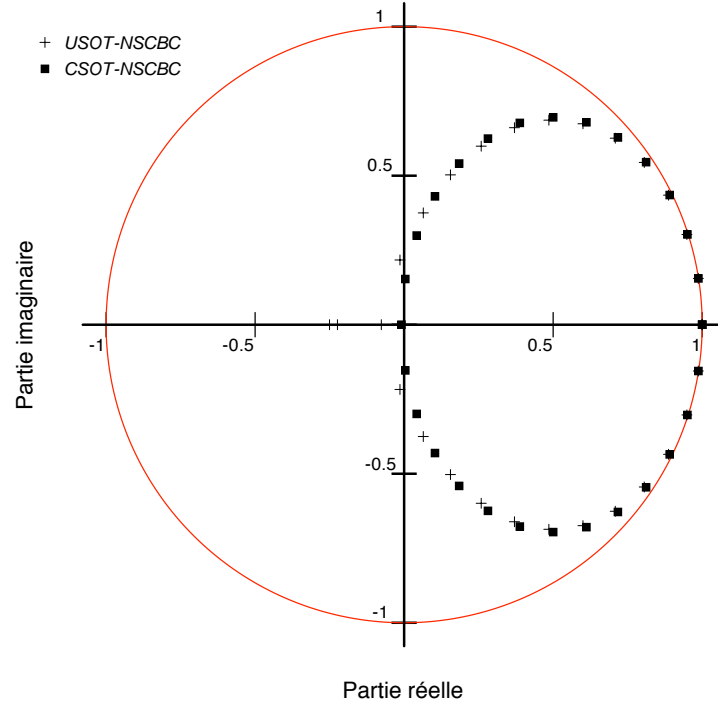


FIG. 6.8 - Parties réelles et imaginaires des valeurs propres λ_k de la matrice d'amplification $[Q]$ pour les conditions limites caractéristiques (+ : LW-C; carrés pleins : LW-D)

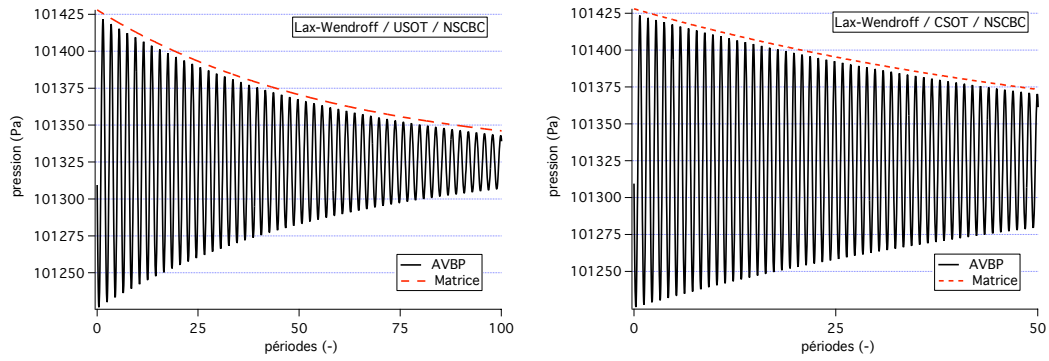


FIG. 6.9 - Comparaison entre la variation de pression fournie par AVBP et le taux de variation indiqué par la méthode de la matrice. A gauche : cas LW-C. A droite : cas LW-D.

6.4.3 Conclusion

La matrice d'amplification est donc un outil de prédiction puissant, permettant de déterminer si un schéma numérique est stable ou non, en tenant compte de la discrétisation aux bords et des conditions limites. On peut donc s'en servir pour tester d'autres méthodes, avant d'envisager les implanter dans un code, sachant que ce dernier travail est souvent long et fastidieux.

Au vu des figures 6.8 et 6.9, on constate que la modélisation des parois rigides par des conditions caractéristiques présente un défaut non négligeable, par rapport aux traditionnelles conditions de Dirichlet : elles dissipent beaucoup plus. Cette dissipation leur permet aussi d'être beaucoup plus stables (le cas

CSOT+DIRIC diverge !). Dans le cas du schéma LW, ce gain en robustesse compense la perte en précision. Toutefois, dès lors qu'on utilise les schémas TTG plutôt que LW, cette perte de précision peut devenir très contraignante. En effet, la diffusion peut sembler excessive dans les cas présentés dans la section 6.1. Dans la section suivante, on va donc montrer une solution envisageable, évaluée avec la méthode de la matrice d'amplification, pour pallier à ce problème de diffusion trop élevée.

6.5 Améliorations possibles de la précision globale des schémas

6.5.1 Dérivées premières plus précises

Seul le cas CSOT + NSCBC nous intéresse (LW-D). C'est, en effet, le cas théoriquement le mieux justifié et c'est aussi le plus stable. Son principal problème est une dissipation trop forte due à une discrétisation de bas ordre aux bords et au terme ABC. On propose donc d'approximer les dérivées premières intervenant dans les équations de ρ_0^{n+1} et ρ_N^{n+1} avec plus de précision. On a alors :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_0^n = \frac{-u_2^n + 4u_1^n - 3u_0^n}{2h} \quad (6.56)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_N^n = \frac{u_{N-2} - 4u_{N-1} + 3u_N^n}{2h} \quad (6.57)$$

En réécrivant les termes (6.46) et (6.48), en considérant les relations (6.56) et (6.57), on peut construire la matrice d'amplification $[\mathbf{Q}]_2$ et calculer ses valeurs propres.

On réalise une comparaison entre les valeurs propres de la matrice $[\mathbf{Q}]_2 = [\mathbf{Q}]_c + [\mathbf{Q}]_{b,2}$ (ordre 2 en précision pour dérivées premières) et celles de la matrice $[\mathbf{Q}]_1 = [\mathbf{Q}]_c + [\mathbf{Q}]_{b,1}$ (ordre 1 pour les dérivées premières) définie en utilisant (6.17) et (6.55). Pour ce faire, on fixe le CFL à 0.07. On obtient les spectres de la figure 6.10.

Les valeurs propres de plus grand module strictement inférieur à 1 sont indiquées dans le tableau 6.5.1

Matrice	$[\mathbf{Q}]_1$	$[\mathbf{Q}]_2$
$ \lambda_m $	0.999945	0.9999992

TAB. 6.2 - Valeur propre de plus grand module strictement inférieur à 1 pour les deux types d'approximations des dérivées premières.

On peut, dès lors, tracer l'enveloppe théorique de la variation de pression au cours du temps, d'une manière similaire aux résultats présentés au paragraphe 6.4. La figure 6.12 montre différentes enveloppes pour les approximations précises à l'ordre 1 et 2. Comme on s'y attendait, l'approximation d'ordre 2 permettant un gain en précision au bord, les résultats obtenus avec celle-ci sont meilleurs (amortissement quasi-nul pour un CFL de 0.07) qu'avec une dérivée première à l'ordre 1. En revanche, le revers de la médaille concerne la stabilité de la méthode obtenue. La figure 6.11 indique, en effet, qu'au delà d'un CFL de 0.1, la méthode diverge (au moins une valeur propre de module plus grand que 1), alors qu'avec la dérivée au bord à l'ordre 1, la limite obtenue en CFL est 1. La correction ne présente donc qu'un faible intérêt, du fait de sa stabilité réduite.

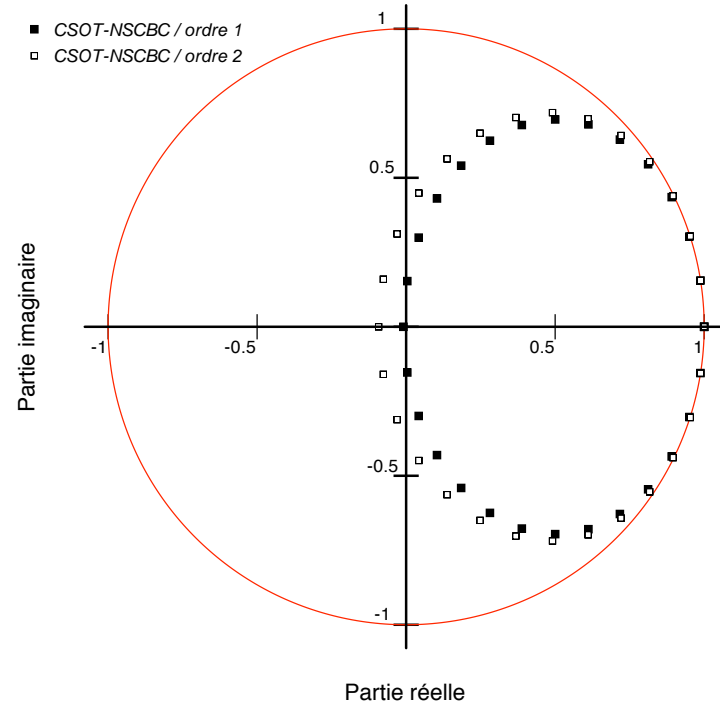


FIG. 6.10 - Valeurs propres de la matrice d'amplification pour deux approximations des dérivées premières différentes dans le cas LW-D. Carrés pleins : ordre 1 ; Carrés blancs : ordre 2

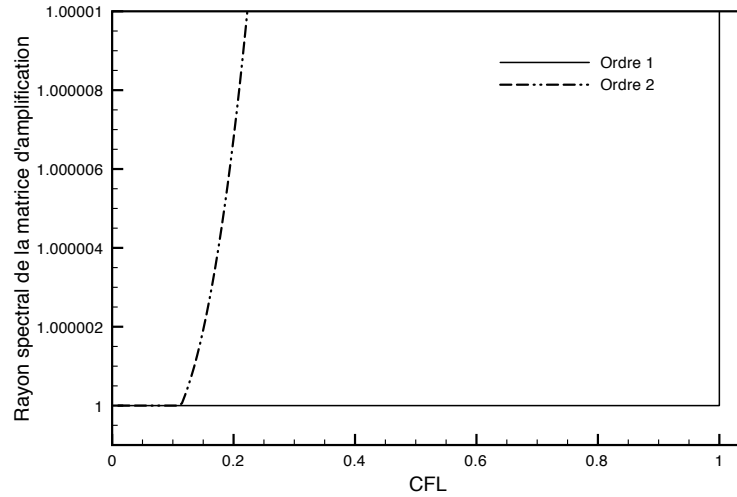


FIG. 6.11 - Domaines de stabilité des schémas LW avec une formulation CSOT et des conditions limites caractéristiques, avec différentes approximations pour les dérivées d'ordre 1 aux bords.

6.5.2 Intégration temporelle d'ordre 2 aux bords

L'instabilité du couple CSOT + Dirichlet a déjà été observée et rappelée par Thompson [?]. Un argument plausible pour expliquer la divergence des calculs à long terme vient de la différence d'intégration

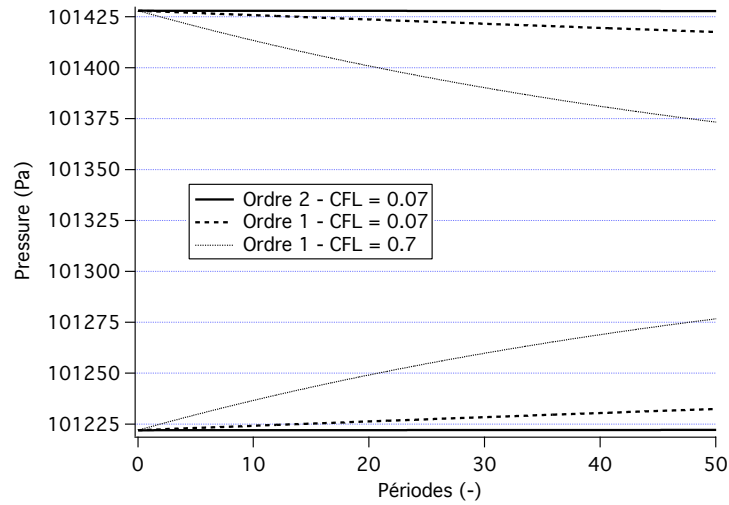


FIG. 6.12 - Enveloppe théorique temporelle de la variation de pression au point de mesure indiqué figure 6.1, pour différentes approximations aux bords.

temporelle entre le centre du domaine de calcul, à l'ordre 2 et les bords, à l'ordre 1. En effet, on rappelle que la fermeture CSOT consiste à annuler tout le terme diffusif du schéma LW, dont l'origine est une dérivée temporelle d'ordre 2. Ainsi, supprimer ce terme diffusif revient à réduire l'intégration temporelle au schéma d'Euler, qui peut être instable avec certaines discrétisations spatiales.

Du fait de la forte restriction du domaine de stabilité, lorsque les dérivées spatiales d'ordre 1 sont calculées avec plus de précision, l'intérêt de cette amélioration est limité. Assurer une dérivation temporelle d'ordre 2 aux bords permettrait, sans doute, un gain en stabilité. Pour ce faire, deux solutions sont envisageables mais n'ont pas été testées pendant cette thèse :

- Une intégration temporelle en 2 étapes aux bords (intégration de Heun par exemple [?])
- Plutôt que l'annuler pour les noeuds de bord, on peut décider de calculer la dérivée spatiale d'ordre 2 avec une approximation aux différences décentrées (ce qui implique d'élargir le stencil).

6.6 Conclusions

La méthode de la matrice est donc un outil très puissant permettant d'étudier la stabilité des méthodes numériques, à l'instar de la méthode de Von Neumann. Son gros avantage repose sur la possibilité de prendre en compte, à la fois, les discrétisations de bord et les conditions limites. Comme on l'a vu dans la section 6.4, cette méthode donne la possibilité d'étudier les schémas numériques d'AVBP (sous certaines conditions), avant de les implanter directement dans le code, ce qui peut constituer un gain de temps considérable.

Un exemple d'application a été abordé, section 6.5. La méthode de la matrice a permis de mettre en évidence un gain de précision sensible (un taux d'amortissement plus faible), lorsque les dérivées spatiales premières aux bords sont calculées sur 3 points plutôt que 2. Néanmoins, elle indique aussi que le domaine de stabilité est fortement réduit (et on peut craindre qu'en 2D ou en 3D, la réduction du domaine de stabilité soit encore plus importante), limitant ainsi l'intérêt de coder cette correction dans AVBP.

Enfin, on terminera en relativisant le problème mis en évidence sur le mode acoustique dans la cavité. La majorité des modes qui nous intéressent le plus, dans le cadre d'étude des instabilités de combustion, ont une fréquence souvent inférieure à 1000 Hz. Si on considère une vitesse du son de 800 m/s, alors on obtient une longueur d'onde de 0.8 m. En imaginant que la taille de maille moyenne dans la chambre est inférieure au centimètre (en réalité, les mailles sont bien plus petites !), on a donc plus de 80 points pour résoudre le mode, c'est-à-dire bien plus que dans l'exemple étudié ici ! En revanche, dans un cas d'aéro-acoustique, cette remarque serait certainement plus nuancée. Une conclusion plus générale est donc que le choix du schéma TTGC (ou LW) et de la formulation CSOT aux bords, combinée avec des conditions limites NSCBC, reste un excellent compromis pour les LES en combustion. C'est donc ce qui sera utilisé dans le chapitre suivant.

Lire
la suite
de la thèse